

COLISIONES CUÁNTICAS EN UNA DIMENSIÓN¹

J.G. Muga

*Departamento de Física Fundamental y Experimental, Facultad de Física,
Universidad de La Laguna, Tenerife*

Abstract: Quantum scattering theory in one dimension, stationary and time dependent, is reviewed. The basic operator formalism is provided and its relation to reflection and transmission amplitudes is spelled out. Symmetries, the unitarity of the S matrix, and analytical properties are examined. Especial attention is paid to the scattering of wave packets, in particular to formulae for the transmittance, wave functions, dwell times, decay behaviour, short and long time behaviour. The simple real potential case is examined as well as complex potentials, potentials with different asymptotic limits at plus and minus infinity and time dependent potentials. Numerical, approximate methods, and transfer matrix techniques are also discussed.

Resumen: Este trabajo es una revisión de la teoría cuántica de colisiones en una dimensión, en sus versiones “estacionaria” y “dependiente del tiempo”. Se proporciona el formalismo de operadores y su relación con las amplitudes de reflexión y transmisión. Se examina el efecto de las simetrías, la unitariedad de la “matriz S ” y sus propiedades analíticas. Se presta especial atención a la colisión de paquetes de ondas, en particular se obtienen fórmulas para la transmitancia, funciones de onda, tiempos de permanencia, y para el comportamiento asintótico a tiempos cortos y grandes. Se examina el caso sencillo de potencial real así como potenciales complejos, potenciales con diferentes límites asintóticos en más y menos infinito y potenciales dependientes del tiempo. Se discuten también métodos aproximados y numéricos.

¹Este trabajo obtuvo el Premio de la Academia Canaria de Ciencias (Concurso del año 1996) correspondiente a trabajos de investigación o de revisión de temas de interés científico sobre materias correspondientes al campo de la Física.

Contenidos

1 Introducción

2 Premisas básicas y notación

3 Teoría formal: Operadores abstractos y parametrizados

4 Simetrías

4.1 Invarianza de inversión temporal

4.2 Paridad

5 Estados propios del Hamiltoniano H

5.1 Relación entre los coeficientes de reflexión y transmisión con
los operadores básicos

5.2 Soluciones de Jost y propiedades analíticas

5.3 Unitariedad y sus consecuencias

6 Dependencia temporal

6.1 ¿Qué es un estado asintótico?

6.2 Algunas fórmulas útiles

6.3 La transmitancia

6.4 Una medida de la duración de la colisión: El tiempo de per-
manencia

6.5 Importancia de las fases. Retardos. Tiempos de llegada

6.6 Comportamiento a tiempos grandes

6.7 Comportamiento a tiempos cortos

- 7 Potenciales complejos
 - 7.1 Formalismo
 - 7.2 Absorbentes
- 8 Niveles asintóticos diferentes
- 9 Potenciales dependientes del tiempo
- 10 Métodos numéricos y aproximados
 - 10.1 Paquetes de onda dependientes del tiempo
 - 10.2 Métodos de matrices de transferencia
 - 10.3 Colisiones múltiples
 - 10.4 Ecuaciones diferenciales
 - 10.5 Aproximación clásica de la transmitancia
 - 10.6 El método WKB y sus limitaciones
- 11 Conclusiones

1 Introducción

La teoría cuántica de colisiones estudia choques entre partículas o entre partículas y campos externos. Las colisiones son procesos localizados en el espacio y en el tiempo. Es útil distinguir cualitativamente tres etapas: *antes*, *durante* y *después* del intervalo temporal en el que la interacción es efectiva. Antes y después de la interacción el sistema se mueve “libremente” con respecto a la parte del potencial que se anula asintóticamente. La teoría también trata procesos de “decaimiento” en los que el sistema comienza en la zona de interacción y posteriormente se desplaza a la zona asintótica.

En los textos de teoría de colisiones el caso sencillo de las colisiones elásticas se presenta de forma invariable en un espacio de coordenadas tridimensional (típicamente discutiendo campos de fuerzas centrales), y no se presta ninguna atención a las colisiones en una dimensión. Podemos encontrar algunos ejemplos de colisiones en una dimensión en libros de mecánica cuántica. Pero estos tratamientos ignoran el lenguaje y las poderosas técnicas de la teoría de colisiones, tales como la formulación en términos de operadores, y se concentran en soluciones directas de la ecuación de Schrödinger en casos resolubles analíticamente (por ejemplo igualando la función de onda y su derivada en los bordes de la “barrera cuadrada”) para obtener amplitudes de transmisión y reflexión. La teoría de colisiones en una dimensión es el marco adecuado para ir más allá de estos casos sencillos.

Muchos sistemas físicos pueden describirse en una dimensión (1D): La aplicación de la aproximación de la *masa efectiva* en estructuras semiconductoras de capas lleva a una ecuación efectiva en una dimensión [1]. Multitud de recientes publicaciones se dedican a estudiar aspectos particulares de las colisiones monodimensionales en estas “heteroestructuras”. Algunos

fenómenos de superficie, y las reacciones químicas en ciertas condiciones pueden también describirse mediante modelos en 1D [2]. La ventaja evidente de estos modelos es su simplicidad. Debido a ella son útiles desde un punto de vista pedagógico y también como herramientas de investigación. Permiten poner a prueba hipótesis, nuevas ideas, métodos de aproximación y teorías sin complicaciones innecesarias o costosas computacionalmente [3,4]. Por último, estos modelos se emplean con frecuencia para examinar cuestiones fundamentales de la mecánica cuántica.

La teoría de colisiones en una dimensión espacial presenta interesantes peculiaridades que hasta el momento no han sido recogidas en ninguna monografía, aunque existe un buen número de publicaciones dispersas sobre el tema. Este trabajo pretende cubrir parte de esta laguna. El asunto es suficientemente amplio como para tener que efectuar una selección de materias. La que aquí se propone trata fundamentalmente de cubrir todos los aspectos que un usuario ocasional de la teoría puede requerir, e incluye una colección de fórmulas que no se encuentran en los textos de teoría de colisiones. Algunas no habían sido obtenidas con anterioridad y otras son sólo conocidas por un reducido número de expertos. En cuanto al nivel de rigor matemático hemos adoptado el “método del físico”. Esto significa que han de verificarse un número de hipótesis en las aplicaciones concretas, tales como la existencia de los operadores de Möller, la completitud asintótica de estados de colisión, o ciertas propiedades analíticas de elementos de matriz de la resolvente. Para los lectores con inclinaciones matemáticas señalaremos los puntos donde aún se requiere una clarificación rigurosa; esto ocurre especialmente en la sección dedicada a las colisiones dependientes del tiempo. Esta monografía se dedica al *problema directo* que estudia la solución de la ecuación de Schrödinger con un potencial de interacción supuestamente conocido. El *problema inverso*

consiste en recuperar el potencial a partir de información parcial o total de la solución. Por supuesto, los dos problemas están relacionados, pero el inverso requiere unas técnicas y un lenguaje propios [5-11] que no discutiremos.

Una importante sección se dedica a colisiones “dependientes del tiempo” y procesos de decaimiento. A pesar de la inherente dependencia temporal de un proceso de colisión los textos usuales prestan más atención a la versión “estacionaria” de la teoría, que estudia las soluciones de la ecuación estacionaria de Schrödinger. Esto se debe en parte a que el experimento de colisión convencional de haces moleculares (dirigido a obtener *secciones eficaces*) se realiza en condiciones cuasi estacionarias, y también porque los estados estacionarios forman una base para analizar el proceso real dependiente del tiempo. En muchos textos la evolución de paquetes de ondas se relega a justificar en el límite monoenergético la derivación de expresiones para la sección eficaz obtenidas mediante el formalismo estacionario, y a discutir brevemente tiempos de vida de resonancias. Sin embargo, en procesos de decaimiento de estados inestables el parámetro relevante es el tiempo de vida en vez de la sección eficaz, y de hecho es cada vez más importante considerar explícitamente la dependencia temporal en casos más generales. Los experimentos modernos de colisiones incorporan láseres con pulsos de brevísima duración (femtosegundos) que hacen posible observar el movimiento de los paquetes de ondas en tiempo real, y diseñar estados iniciales particulares para lograr comportamientos dinámicos específicos. La teoría debe adaptarse a estas nuevas necesidades prestando más atención a la caracterización temporal. De hecho, debemos estudiar el proceso completo de colisión, que incluye la etapa transitoria (durante la colisión), y no sólo los regímenes asintóticos. La bibliografía tradicional de teoría de colisiones destaca la conexión entre los dos regímenes asintóticos pero desprecia lo que ocurre en la

región intermedia de interacción por considerarla “no observable”.

Pueden plantearse muchas generalizaciones del caso sencillo de una partícula sin estructura que se mueve bajo el efecto de un potencial real y local en una dimensión. Nos limitaremos aquí a las colisiones, descritas en una dimensión matemática, de una partícula sin estructura con un blanco, la *barrera de potencial*. Hemos preferido una presentación más pedagógica que compacta: en lugar de describir una teoría general válida para potenciales arbitrarios pero notacionalmente farragosa, estudiaremos primero el caso más simple con detalle. Algunas de las complicaciones se discuten en secciones posteriores dedicadas a potenciales con niveles asintóticos diferentes a derecha e izquierda, potenciales complejos no hermíticos e interacciones dependientes del tiempo. Una interpretación amplia de la expresión “colisiones en una dimensión” podría incluir colisiones inelásticas y reactivas de sistemas compuestos por partículas limitadas a un movimiento rectilíneo pero no estudiaremos este caso.

2 Premisas básicas y notación

En un marco no relativista, el operador Hamiltoniano para una partícula sencilla (sin estructura) en una dimensión puede escribirse como $H = H_0 + V$, donde

$$H_0 = \frac{p_{\text{op}}^2}{2m} \quad (1)$$

es el operador de energía cinética en términos del operador momento p_{op} , y V es el potencial. Supondremos en general que V es un operador local, es decir en representación de coordenadas tiene como elementos de matriz

$$\langle x|V|x'\rangle = \delta(x - x')V(x), \quad (2)$$

y que $V(x)$ se anula con suficiente rapidez (el criterio se especificará más adelante) para valores grandes de $|x|$. [El subíndice “op” se usa en aquellos operadores cuánticos que puedan confundirse con números ordinarios o funciones.] Los estados propios de p_{op} y H_0 son *ondas planas* con momento definido $|p\rangle$,

$$\langle x|p\rangle = h^{-1/2} e^{ixp/\hbar}. \quad (3)$$

Están normalizados a la delta de Dirac,

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p'). \quad (4)$$

Las relaciones de cierre (o resoluciones del operador unidad 1_{op}) pueden escribirse en representación de coordenadas o de momentos,

$$1_{\text{op}} = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x| = \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle\langle p|. \quad (5)$$

3 Teoría formal: Operadores abstractos y parametrizados

En esta sección y en la siguiente trasladamos a una dimensión la teoría formal que se describe en las monografías dedicadas a las colisiones en el espacio de tres dimensiones. Los libros de Taylor o Newton [12,13] pueden servir de apoyo para aclarar el origen de las fórmulas o aspectos de rigor matemático.

El estado normalizado de la partícula en el espacio de Hilbert se denota como $\psi(t)$. En el pasado y futuro remotos evoluciona esencialmente de forma libre, y tiende (en el sentido de un *límite fuerte*) a los estados asintóticos de *entrada* y *salida*, ϕ_{ent} y ϕ_{sal} respectivamente,

$$\psi(t) \rightarrow \phi_{\text{ent}}(t) \quad , \quad t \rightarrow -\infty \quad (6)$$

$$\psi(t) \rightarrow \phi_{\text{sal}}(t) \quad , \quad t \rightarrow \infty. \quad (7)$$

Los operadores de la teoría de colisiones se formulan en versiones *abstractas* o *parametrizadas* que no debemos confundir. (Esto ocurre con cierta frecuencia a causa de una notación deficiente). En esta sección se proporcionan las definiciones y fórmulas básicas. Los operadores de Möller conectan los estados asintóticos con el estado real ψ , y S conecta los dos estados asintóticos,

$$\psi(t) = \Omega_+ \phi_{\text{ent}}(t) \quad (8)$$

$$\psi(t) = \Omega_- \phi_{\text{sal}}(t) \quad (9)$$

$$\phi_{\text{sal}}(t) = S \phi_{\text{ent}}(t). \quad (10)$$

Los operadores abstractos se definen mediante límites (fuertes) que implican tiempos infinitos,

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \mp \infty} e^{iHt/\hbar} e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (11)$$

$$T^{\pm} = V \Omega_{\pm} \quad (12)$$

$$S = \Omega_-^{\dagger} \Omega_+. \quad (13)$$

T y S son los operadores de *transición* y *colisión* respectivamente (la forma más habitual de nombrarlos es operador “te” y operador “ese” respectivamente). Estos límites pueden existir cuando los operadores actúan sobre estados del espacio de Hilbert de funciones de cuadrado integrable. Sin embargo es conveniente considerar una extensión que pueda aplicarse a ondas planas, que están fuera del espacio de Hilbert pero constituyen una base útil para sus funciones. Definiremos primero los operadores parametrizados

$$\Omega(z) = 1 + G_0(z) T_{\text{op}}(z) \quad (14)$$

$$T_{\text{op}}(z) = V + V G(z) V, \quad (15)$$

donde z es una variable compleja con dimensiones de energía, y se han introducido las resolventes de H y de H_0 , $G(z) = (z - H)^{-1}$ y $G_0(z) = (z - H_0)^{-1}$

respectivamente. Las relaciones entre $G(z)$, $G_0(z)$, $T_{\text{op}}(z)$ y V son

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)T_{\text{op}}(z)G_0(z) \quad (16)$$

$$T_{\text{op}}(z)G_0(z) = VG(z) \quad (17)$$

Las resolventes son singulares en el eje real positivo (con un corte de rama) y en polos sobre el eje real negativo (estados ligados) del plano z .

La relación entre operadores abstractos y parametrizados se encuentra actuando con (11) sobre una estado de cuadrado integrable. Puede introducirse un factor de convergencia sin cambiar el valor de la integral,

$$\Omega_+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt e^{\varepsilon t} e^{iHt/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} \quad (18)$$

$$\Omega_- = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \varepsilon \int_0^{\infty} dt e^{-\varepsilon t} e^{iHt/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar}. \quad (19)$$

Usando ahora una relación de cierre en momentos se obtiene

$$\Omega_{\pm}|\phi\rangle = \int dp \Omega(E_p \pm i0)|p\rangle\langle p|\phi\rangle \quad (20)$$

$$T^{\pm}|\phi\rangle = \int dp T_{\text{op}}(E_p \pm i0)|p\rangle\langle p|\phi\rangle. \quad (21)$$

A diferencia de los operadores abstractos, la acción de los operadores $\Omega(E_p \pm i0)$ sobre las ondas planas está bien definida. En particular, pueden obtenerse de esta forma estados propios de H ,

$$|p^{\pm}\rangle = \Omega(E_p \pm i0)|p\rangle = |p\rangle + \frac{1}{E_p \pm i0 - H_0} T_{\text{op}}(E_p \pm i0)|p\rangle. \quad (22)$$

Llamaremos al segundo término de la parte derecha de esta ecuación integral “onda difundida” para distinguirlo de la “onda plana” del primer término. Para obtener una representación de coordenadas y evaluar el comportamiento asintótico se requieren los elementos de matriz de la resolvente,

$$\langle x | \frac{1}{E_p \pm i0 - H_0} | x' \rangle = \mp \frac{im}{\hbar|p|} e^{\pm i|p||x-x'|/\hbar}. \quad (23)$$

Asintóticamente ($|x|$ grande y x' fijo),

$$\langle x | \frac{1}{E_p \pm i\epsilon - H_0} | x' \rangle = \mp \frac{im}{\hbar |p|} e^{\pm i|px|/\hbar}. \quad (24)$$

Las dos formas de acercamiento al eje real, desde abajo o desde arriba, en (23) implican diferentes condiciones de contorno. Para $|p^+\rangle$ la onda difundida se forma con ondas salientes, y para $|p^-\rangle$ con ondas entrantes.

Podemos introducir las siguientes resoluciones de los operadores Ω , T y S :

$$\Omega_{\pm} = \int dp |p^{\pm}\rangle \langle p| \quad (25)$$

$$T^{\pm} = V \int dp |p^{\pm}\rangle \langle p| \quad (26)$$

$$S = \int \int dp dp' |p'\rangle \langle p'^- | p^+ \rangle \langle p|. \quad (27)$$

Estrictamente los operadores en las ecuaciones (25-27) no son idénticos a los de las ecuaciones en (11-13) puesto que el dominio de los parametrizados incluye las ondas planas. Sin embargo, al actuar sobre estados del espacio de Hilbert son equivalentes, de manera que para evitar una notación complicada usaremos el mismo símbolo.

Si el potencial $V(x)$ es real la colisión conserva la norma, $\langle \phi_{\text{ent}} | \phi_{\text{ent}} \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = \langle \phi_{\text{sal}} | \phi_{\text{sal}} \rangle$. Esto significa que los operadores de Möller son *isométricos*,

$$\Omega_{\pm}^{\dagger} \Omega_{\pm} = 1_{\text{op}}. \quad (28)$$

Los *estados de colisión* $\psi(t)$ con asíntotas entrantes y salientes se alejan del potencial en el pasado y futuro remotos por lo que son ortogonales a los estados ligados $\{|\Phi_j\rangle\}$, localizados en la zona de interacción, a tiempos (positivos o negativos) grandes. Como el solapamiento de dos estados cualesquiera $\langle \psi | \Phi_j \rangle = 0$ es independiente del tiempo, el espacio de estados ligados es de

hecho ortogonal al de estados de colisión, es decir, al *rango* de los operadores de Möller. Supondremos siempre que los rangos de los dos operadores de Möller son iguales (subespacio de estados de colisión), y que el espacio de Hilbert puede dividirse en el subespacio de estados ligados y el subespacio de estados de colisión. Esta propiedad se conoce como *completitud asintótica*,

$$\Omega_{\pm}\Omega_{\pm}^{\dagger} = 1_{\text{op}} - \Lambda, \quad (29)$$

y se satisface por la mayoría de potenciales que se encuentran en la práctica. En esta expresión el operador “deficiencia unitaria” Λ proyecta al espacio de estados ligados,

$$\Lambda = \sum_j |\Phi_j\rangle\langle\Phi_j|. \quad (30)$$

Como consecuencia de la isometría (28) la normalización de los estados $|p^{\pm}\rangle$ coincide con la de las ondas planas,

$$\langle p^{\pm}|p'^{\pm}\rangle = \delta(p - p'). \quad (31)$$

Pueden obtenerse varias resoluciones de la identidad usando conjuntos completos de estados propios de H ,

$$1_{\text{op}} = \Lambda + \int dp |p^{\pm}\rangle\langle p^{\pm}|. \quad (32)$$

Otro elemento importante de la teoría es la “matriz S ”. En representación de momentos tiene la forma

$$S_{pp'} = \delta(p - p') - 2i\pi\delta(E_p - E_{p'})\langle p|T_{\text{op}}(E_p + i0)|p'\rangle. \quad (33)$$

Usualmente se introduce una matriz S “en la capa de energía” eliminando una

función delta de energía presente en (33) como un factor común. Usando²

$$\delta(p - p') = \frac{|p|}{m} \delta(E_p - E_{p'}) \delta_{pp'} \quad (34)$$

donde $\delta_{pp'}$ es la delta de Kronecker,

$$\delta_{pp'} = \begin{cases} 1 & \text{si } p = p' \\ 0 & \text{si } p \neq p', \end{cases} \quad (35)$$

y $S_{pp} = |p| m^{-1} \delta(E_p - E_{p'}) S_{pp'}$, la matriz de colisión dos por dos *en la capa de energía* $\langle p | S | p' \rangle$ se define mediante

$$\langle p | S | p' \rangle = \delta_{pp'} - \frac{2i\pi m}{|p|} \langle p | T_{\text{op}}(E_p + i0) | p' \rangle, \quad p = \pm p'. \quad (36)$$

4 Simetrías

4.1 Invarianza de inversión temporal

El operador de inversión temporal θ actúa sobre los estados propios de la posición y del momento como

$$\theta |p\rangle = |-p\rangle, \quad \theta |x\rangle = |x\rangle. \quad (37)$$

Es antilineal y antiunitario,

$$\theta c |\psi\rangle = c^* \theta |\psi\rangle \quad (38)$$

$$\theta \theta^\dagger = \theta^\dagger \theta = 1_{\text{op}}, \quad (39)$$

(c es cualquier constante compleja). Como θ es antilineal la acción del operador adjunto $\theta^\dagger$ viene dada por

$$\langle \phi, \theta^\dagger \psi \rangle = \langle \theta \phi, \psi \rangle^*. \quad (40)$$

²En general

$$\delta(E_p - E_{p'}) = \frac{m}{|p|} [\delta(p - p') + \delta(p + p')].$$

(Para evitar errores es conveniente usar la “notación de los matemáticos” para los productos escalares en vez de la notación usual de Dirac.)

Suponiendo que el potencial es real se cumple que $[\theta, H] = 0$, y por tanto θ cambia el signo de los operadores de Möller,

$$\theta\Omega_{\pm} = \Omega_{\mp}\theta. \quad (41)$$

Como consecuencia,

$$S = \theta^{\dagger}S^{\dagger}\theta, \quad (42)$$

y (en la capa de energía)

$$\langle p|S|p'\rangle = \langle -p'|S|-p\rangle \quad (43)$$

$$\langle p|T^{\pm}|p'\rangle = \langle -p'|T^{\pm}|-p\rangle. \quad (44)$$

4.2 Paridad

Muchos modelos de potencial son simétricos con respecto a una posición central $x = 0$. El operador paridad Π es unitario y cambia el signo de los vectores propios de posición y momento, $\Pi|x\rangle = |-x\rangle$, y $\Pi|p\rangle = \Pi|-p\rangle$. Para Hamiltonianos invariantes frente a transformaciones de paridad (potenciales pares) $[\Pi, H] = 0$ y $[\Pi, \Omega_{\pm}] = 0$. Por tanto,

$$\langle p|T^{\pm}|p'\rangle = \langle -p|T^{\pm}|-p'\rangle \quad (45)$$

$$\langle p|S|p'\rangle = \langle -p|S|-p'\rangle. \quad (46)$$

5 Estados propios del Hamiltoniano H

Los estados propios de H dados por las ecuaciones integrales de Lippmann-Schwinger (22) se comportan asintóticamente, de acuerdo con (24), como una combinación de ondas planas con momentos positivos y negativos. Los

factores que multiplican estas ondas planas son las amplitudes de reflexión y transmisión según la siguiente tabla (supondremos por ahora que $p > 0$)

$$\frac{1}{h^{1/2}} \begin{cases} \exp(ipx/\hbar) + R^l(p) \exp(-ipx/\hbar), & \text{si } x \sim -\infty \\ T^l(p) \exp(ipx/\hbar), & \text{si } x \sim \infty, \end{cases} \quad (47)$$

$$\frac{1}{h^{1/2}} \begin{cases} T^r(p) \exp(-ipx/\hbar), & \text{si } x \sim -\infty \\ \exp(-ipx/\hbar) + R^r(p) \exp(ipx/\hbar), & \text{si } x \sim \infty. \end{cases} \quad (48)$$

Para $p > 0$ estas funciones son las representaciones de coordenadas de $\langle x|p^+ \rangle$ y $\langle x|(-p)^+ \rangle$, respectivamente, correspondientes a una onda plana *entrante* desde la izquierda, $\langle x|p \rangle$, o desde la derecha $\langle x| - p \rangle$. $T(p)$ y $R(p)$ son *amplitudes de transmisión y reflexión* para estos estados *estacionarios*. Si se formara un paquete de ondas de cuadrado integrable dominado por $|p^+ \rangle$ [14], este paquete sería localmente parecido a la onda plana $|p \rangle$ antes de la colisión. Después de la colisión se separaría en dos paquetes, uno reflejado y otro transmitido, con probabilidades $|R|^2$ y $|T|^2$.

Sin embargo para $p < 0$ los estados en (47) y (48) corresponden, respectivamente, a $\langle x|p^- \rangle$, con onda plana *saliente* $\langle x|p \rangle$, y $\langle x| - p^- \rangle$, con onda plana *saliente* $\langle x| - p \rangle$. Como antes la expresión “*saliente*” se refiere a un paquete de ondas dominado por $|p^- \rangle$. Este paquete de ondas sería localmente parecido a una onda plana sólo *después* de la colisión, de forma que la asíntota entrante debe combinar ondas incidentes desde los dos lados de la barrera. Esta combinación puede ser difícil de conseguir en la práctica, lo cual no impide la utilidad de estos estados como funciones base, y en general en aplicaciones donde se controla o selecciona el estado final en lugar (o además) de prepararse el estado inicial.

Nótese que $T(p < 0)$ *no* es una amplitud de transmisión estándar. Sin embargo, continúa analíticamente la amplitud de transmisión $T(p > 0)$ al dominio $p < 0$, y mantendremos el mismo nombre, “amplitud de transmisión”,

independientemente del signo de p . De acuerdo con nuestra convención los argumentos positivos de las amplitudes corresponden a estados $|p^+\rangle$, mientras que argumentos negativos corresponden a estados $|p^-\rangle$.

El *coeficiente de reflexión*, $\mathcal{R} = |R(p)|^2$, es el cociente entre la magnitud del flujo reflejado, j^R , y el flujo entrante j^{ent} ; mientras que el *coeficiente de transmisión*, $\mathcal{T} = |T(p)|^2$, es el cociente entre los flujos transmitido j^T y entrante.³ De las anteriores definiciones se desprende que $j^T = j^{\text{ent}}(1 - |R(p)|^2)$ y $|T(p)|^2 = 1 - |R(p)|^2$, en concordancia con la conservación del flujo total.

5.1 Relación entre los coeficientes de reflexión y transmisión con los operadores básicos

Para potenciales de soporte finito formados por secuencias de pozos y barreras “cuadrados” las amplitudes T y R se obtienen “empatando” la función de onda y su derivada en los extremos de cada pozo o barrera. Evidentemente, en casos más complicados es necesario un procedimiento más general que se describe en esta sección.

Comparando el comportamiento asintótico (a $|x|$ grande) de los estados en (47) y (48) con el comportamiento asintótico en (22), y usando (24), las amplitudes $R(p)$ y $T(p)$ pueden relacionarse con los elementos de matriz en la capa de energía del operador de transición. Detallaremos un caso a modo de ejemplo. Supongamos $p > 0$ y $x \rightarrow \infty$,

$$\int dx' \langle x | G_0(E_p + i0) | x' \rangle \langle x' | T_{\text{op}}(E_p + i0) | p \rangle \quad (49)$$

$$\sim -\frac{2\pi mi}{h} \frac{e^{ipx/h}}{p} \langle x' | T_{\text{op}}(E_p + i0) | p \rangle = -\frac{2\pi mi}{p} \langle x | p \rangle T_{pp}^+ \quad (50)$$

³ T también se llama en ocasiones “coeficiente de transmisión”, y $\mathcal{T}$ “penetrabilidad”, “transmisividad”, “transparencia de la barrera” o “coeficiente de penetración”.

El resto de los casos puede tratarse de forma similar, en particular

$$T(p) = 1 - \frac{2i\pi m}{p} T_{p,p}^{\text{sign}(p)}. \quad (51)$$

Hemos usado la invarianza de inversión temporal, que implica $T_{p,p}^{\pm} = T_{-p,-p}^{\pm}$, para escribir $T^r(p) = T^l(p) = T(p)$. Las otras amplitudes vienen dadas por

$$\begin{aligned} R^l(p) &= -\frac{2mi\pi}{p} T_{-p,p}^{\text{sign}(p)} \\ R^r(p) &= -\frac{2mi\pi}{p} T_{p,-p}^{\text{sign}(p)}. \end{aligned} \quad (52)$$

De (51) se obtienen las relaciones

$$[T(-p)]^* = T(p), \quad p \text{ real} \quad (53)$$

$$R^{r,l}(-p)^* = R^{r,l}(p). \quad (54)$$

Usando (36), (51) y (52) la matriz S toma la forma

$$S(p) = \begin{pmatrix} T(p) & R^r(p) \\ R^l(p) & T(p) \end{pmatrix} \quad (55)$$

p puede ser positivo o negativo pero de hecho uno de estos casos, por ejemplo $p > 0$ contiene toda la información de acuerdo con (53),

$$S^\dagger(p) = \tilde{S}(-p) \quad (56)$$

$$S^*(p) = S(-p). \quad (57)$$

Una diferencia importante entre las colisiones en la recta real, $-\infty < x < \infty$, y las colisiones radiales en un semieje, $0 < r < \infty$, es que en las primeras la matriz S es una matriz unitaria 2×2 mientras que en las segundas es un número complejo de módulo unidad. En un caso el espectro es degenerado y en el otro simple.

5.2 Soluciones de Jost y propiedades analíticas

Ya se han descrito dos conjuntos de soluciones linealmente independientes $|p^\pm\rangle$. Otro par de soluciones útiles viene dado por las *soluciones de Jost*,

$$\begin{aligned}\lim_{x \rightarrow \infty} \psi_1(x) e^{-ipx/\hbar} &= 1 \\ \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi_2(x) e^{ipx/\hbar} &= 1\end{aligned}\tag{58}$$

[Se entiende que $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi_1(x)' e^{-ipx/\hbar} = ip/\hbar$ y $\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi_2(x)' e^{ipx/\hbar} = -ip/\hbar$.]

Estas condiciones de contorno iniciales explícitas facilitan su cálculo numérico y por tanto la obtención de las amplitudes, pero sobre todo permiten examinar las propiedades analíticas de las amplitudes de reflexión y transmisión en el plano complejo. Se relacionan con las soluciones en (47) y (48) por

$$\psi_1 = T(p)^{-1} |p^{\text{sign} p}\rangle\tag{59}$$

$$\psi_2 = T(p)^{-1} |p^{-\text{sign} p}\rangle\tag{60}$$

Las correspondientes ecuaciones integrales se obtienen por medio de las funciones de Green para las condiciones de contorno (58),

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= e^{ipx/\hbar} - \frac{2m}{p} \int_x^\infty \sin[p(x-x')/\hbar] V(x') \psi_1(x') dx' \\ \psi_2(x) &= e^{ipx/\hbar} - \frac{2m}{p} \int_{-\infty}^x \sin[p(x-x')/\hbar] V(x') \psi_2(x') dx'.\end{aligned}\tag{61}$$

Una prueba de la igualdad entre T^r y T^l se obtiene evaluando el Wronskiano $W(\psi_1, \psi_2)$ en ambos lados de la barrera, $W(\psi_1, \psi_2) = -2ik/T^l = -2ik/T^r$ [8].

A partir del comportamiento asintótico de las soluciones de Jost se encuentran expresiones integrales para las amplitudes de transmisión y reflexión,

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{mi}{k\hbar} \int_{-\infty}^\infty e^{-ikx} V(x) \psi_1(x) dx\tag{62}$$

$$= 1 + \frac{mi}{k\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} V(x) \psi_2(x) dx \quad (63)$$

$$R^l/T^l = \frac{m}{ik\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx'} V(x') \psi_1(x') dx' \quad (64)$$

$$R^r/T^r = \frac{m}{ik\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx'} V(x') \psi_2(x') dx' \quad (65)$$

El estudio de las propiedades analíticas de las funciones y amplitudes en el plano complejo de momentos es un campo fascinante pero por falta de espacio nos limitamos a resumir las ideas y los resultados más importantes [15]. Las propiedades analíticas son muy útiles para investigar el comportamiento en umbrales energéticos, las colisiones “resonantes”, efectos transitorios, o evolución a tiempos muy breves o muy grandes. Es fácil probar que las funciones (61) y los coeficientes (62-65) existen en el semiplano superior [8] para potenciales que satisfagan la condición

$$\int dx(1+x^2)|V(x)|. \quad (66)$$

La posibilidad de continuarlas analíticamente al semiplano inferior depende de las propiedades específicas de la función potencial. El punto clave es el comportamiento de las exponenciales en (65). Estas exponenciales crecen en el semiplano inferior sin límite. Sin embargo, si el potencial es de soporte finito las integrales existen en todo el plano excepto en polos sobre el eje imaginario positivo (estados ligados) y polos en el semiplano inferior (resonancias). Si el potencial decae exponencialmente, compensa el crecimiento hasta cierto valor del momento imaginario, lo que permite establecer una banda de analiticidad en el semiplano inferior. El uso de coordenadas complejas permite también extender el dominio de analiticidad excepto posiblemente en el semieje imaginario negativo.

Cuando $T(p)^{-1} = 0$ en el semiplano superior el Wronskiano se hace cero. las dos soluciones de Jost son linealmente dependientes y disminuyen expo-

nencialmente en el infinito, es decir, corresponden a un estado ligado. Estos ceros deben ser simples [8].

Suponiendo que el potencial obedece la restricción (66) se tiene para $\Im mp \geq 0$ [8]

$$T(p) = 1 + O(1/|p|). \quad (67)$$

Si $T(p = 0) = 0$, en la proximidad del origen,

$$T(p) = bp + o(p), \quad b \neq 0 \quad (68)$$

para $\Im mp \geq 0$.

La función compleja $T(p)^{-1}$ puede usarse exactamente como se usa la función de Jost de la onda parcial $l = 0$ en colisiones de potenciales esféricos para obtener el teorema de Levinson. Este teorema relaciona el número de estados ligados n con la fase de la amplitud de transmisión [16-18],

$$\Phi_T(0) - \Phi_T(\infty) = \begin{cases} \pi n - \frac{1}{2} & (\text{no hay estado cuasi-ligado en } p = 0) \\ \pi n & (\text{estado cuasi-ligado en } p = 0) \end{cases} \quad (69)$$

El caso excepcional $T(p = 0) \neq 0$ no corresponde a un estado normalizado, y se asocia con un estado *cuasi-ligado*.

5.3 Unitariedad y sus consecuencias

La unitariedad de la matriz de colisión S , $SS^\dagger = S^\dagger S = 1$ proporciona dos relaciones: de los elementos diagonales se obtiene

$$|T(p)|^2 + |R^{r,l}(p)|^2 = 1, \quad (70)$$

y de los no diagonales,

$$T(p)[R^l(p)]^* + [T(p)]^* R^r(p) = 0, \quad p \text{ real.} \quad (71)$$

Expresando las amplitudes de transmisión y reflexión en términos de módulo y fase,

$$T(p) = |T(p)|e^{i\Phi_T(p)} \quad (72)$$

$$R^{r,l}(p) = |R^{r,l}(p)|e^{i\Phi_{R^{r,l}}(p)}, \quad (73)$$

la ecuación (71) permite relacionar las fases,

$$2\Phi_T + (2n+1)\pi = \Phi_{R^r} + \Phi_{R^l}, \quad (74)$$

donde n es un entero [19]. Resolviendo la ecuación matricial $S\mathbf{a}_s = \lambda_s\mathbf{a}$ se obtienen dos valores propios,

$$\lambda_0 = T + (R^r R^l)^{1/2} \quad (75)$$

$$\lambda_1 = T - (R^r R^l)^{1/2}. \quad (76)$$

Al ser S unitaria, estos valores propios tienen módulo unidad, como se comprueba con (74), y pueden expresarse mediante “desfasajes propios”, $\lambda_s = e^{2i\delta_s}$, $s = 0, 1$,

$$\delta_0 = [\Phi_T + \arctan(|T|/|R|)]/2 \quad (77)$$

$$\delta_1 = [\Phi_T + \arctan(-|T|/|R|)]/2. \quad (78)$$

El producto de valores propios se relaciona con la fase de la amplitud de transmisión, $\det S = \exp 2i\Phi_T$. Los autovectores $\mathbf{a}_s$ proporcionan dos estados linealmente independientes con la propiedad de que las amplitudes de ondas salientes son iguales a las amplitudes de ondas entrantes excepto por el factor de fase $\exp(2i\delta_s)$. Los dos posibles cocientes con esta propiedad entre las amplitudes de ondas entrantes de derecha e izquierda son $\pm(R^l/R^r)^{1/2}$. Si el potencial es par se cumple que $R = R^l = R^r$, y estas soluciones se convierten

en pares e impares con ondas entrantes $|p\rangle \pm |-p\rangle$. Esta circunstancia se ha aprovechado para elaborar un formalismo paralelo al que se emplea para las ondas parciales en tres dimensiones [20-24].

6 Dependencia temporal

La dependencia temporal del estado $\langle x|\psi(t)\rangle$ puede expresarse mediante la cuadratura

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \int dp \langle x|p^\pm\rangle e^{-iE_p t/\hbar} \langle p^\pm|\psi(0)\rangle. \quad (79)$$

Toda la información sobre la evolución del paquete de ondas está en principio contenida en (79), pero es conveniente analizarla en términos de conceptos o parámetros sencillos.

La colisión típica comienza con la preparación de un estado a un lado de la barrera con momento medio dirigido hacia la misma. Supondremos que el estado está a la izquierda y que tiene momento medio positivo. Tras el choque surgen dos paquetes de onda, uno transmitido y otro reflejado, con posiciones centrales retrasadas o adelantadas (según las características del potencial y las energías implicadas) con respecto a un movimiento libre de referencia. La mecánica cuántica se manifiesta a través de una serie de fenómenos peculiares debidos a la deslocalización y coherencia de la función de onda:

- En las colisiones **resonantes** parte del paquete de ondas permanece un tiempo mayor que lo habitual localizado en la zona de interacción. Si la resonancia corresponde a un pico en el coeficiente de transmisión y la anchura en momentos del paquete de ondas inicial es mayor que la anchura de la resonancia el paquete reflejado presenta dos máximos y

un mínimo correlacionado con los momentos transmitidos preferencialmente [25,26]. (Este tipo de correlación posición-momento se aprecia mejor empleando cuasi-distribuciones de probabilidad conjunta de posiciones y momentos tales como la función de Wigner [27].) Si la resonancia corresponde, por el contrario, a un máximo en el coeficiente de reflexión, el mínimo aparece en el paquete transmitido. Las resonancias pueden en general asociarse a singularidades (polos) de las amplitudes de transmisión o reflexión en el semiplano inferior del plano complejo de momentos.

- El **efecto túnel** es otro de los efectos cuánticos paradigmáticos. Las potenciales aplicaciones del efecto túnel resonante, en el que la transmisión por debajo del umbral aumenta de forma significativa en torno a la energía de la resonancia, han impulsado todo un campo de investigación que estudia las propiedades y el diseño de estructuras semiconductoras. Un reto importante consiste en determinar las escalas de tiempo implicadas, pues la intuición clásica no es aplicable. Tan extraño como el efecto túnel, aunque poco comentado, es el efecto contrario según el cual paquetes con energía superior al máximo de la barrera son reflejados en parte. Esto ocurre con potenciales tan sencillos como un “pozo cuadrado”.

Al discutir el efecto túnel en colisiones con paquetes de ondas hay que tener en cuenta que existe cierta ambigüedad en su definición. Como veremos en una sección posterior dedicada a la “transmitancia clásica”, la condición $\langle E \rangle < V_0$ (donde V_0 es el máximo valor de $V(x)$) se considera a veces como definitoria del efecto túnel. Pero esta condición no impide que parte de un colectivo clásico con la misma distribución

energética y valor medio que el estado cuántico atraviese la barrera con similar probabilidad que el clásico. Para que el efecto túnel sea genuino es necesario que el paquete de ondas transmitido esté fundamentalmente compuesto por momentos por debajo del umbral clásico $(2mV_0)^{1/2}$.

- La colisión permite además el acceso a valores “prohibidos” clásicamente de determinadas variables, tales como el momento. En una colisión de un colectivo estadístico clásico con una barrera positiva que tienda a cero a derecha e izquierda se cumple necesariamente la desigualdad (para todo p_1 y todo t)

$$\int_{p_1}^{\infty} dp f(p, t) < \int_{p_1}^{\infty} dp f(p, 0), \quad (80)$$

donde $f(p, t)$ es la densidad de probabilidad de momento p a tiempo t . Sin embargo esta desigualdad puede violarse en el caso cuántico.

6.1 ¿Qué es un estado asintótico?

Puesto que los operadores de Möller son isométricos podemos escribir

$$\langle p^+ | \psi(0) \rangle = \langle p | \Omega_+^\dagger \Omega_+ | \phi_{\text{ent}}(0) \rangle \quad (81)$$

en la ecuación (79). En muchas simulaciones numéricas el estado se coloca lejos del potencial en el instante en que se inicia el cálculo, convencionalmente $t = 0$. En un experimento, $t = 0$ puede identificarse con el tiempo de preparación. Al no existir solapamiento con el potencial en este instante la tentación es escribir $\psi(0) = \phi_{\text{ent}}(0)$. En general esta substitución no es correcta. Recordemos el significado de ϕ_{ent} . Es un estado que evoluciona libremente al cual tiende el estado real en el pasado remoto. Sin embargo, si el

estado inicial $\psi(0)$ tiene componentes negativas parte del paquete se moverá hacia el potencial al disminuir t , y finalmente chocará con él. Un verdadero estado asintótico localizado a la izquierda del potencial se caracteriza por tanto por tener sólo componentes de momento positivas. Paradójicamente esto es imposible desde un punto de vista estricto, ya que la localización en un semiespacio de coordenadas conlleva una deslocalización en momentos, pero en la práctica podemos acercarnos suficientemente a este caso ideal, por ejemplo mediante paquetes de ondas Gaussianos con varianzas seleccionadas de forma que el solapamiento inicial con momentos negativos y posiciones positivas sea despreciable.

6.2 Algunas fórmulas útiles

En una simulación numérica o en un experimento real el estado inicial a tiempo $t = 0$ no es necesariamente un estado asintótico, es decir no se puede identificar $\psi(0)$ con $\phi_{ent}(0)$ debido a la posible presencia de momentos negativos. Supongamos únicamente que el estado inicial está bien localizado a la izquierda de la barrera de forma que se cumpla

$$\langle p^+ | \psi(0) \rangle = \begin{cases} \langle p | \psi(0) \rangle + \langle -p | \psi(0) \rangle R^l(p) & p > 0 \\ \langle p | \psi(0) \rangle T(-p) & p < 0 \end{cases} \quad (82)$$

Entonces la integral (79) puede separarse en dos partes,

$$\begin{aligned} \langle x | \psi(t) \rangle &= \int_0^\infty dp \langle x | p^+ \rangle e^{-iE_p t/\hbar} \langle p | \psi(0) \rangle \\ &+ \int_{-\infty}^0 dp e^{-iE_p t/\hbar} \langle p | \psi(0) \rangle \left[\langle x | p^+ \rangle T(p) + \langle x | -p^+ \rangle R^l(p) \right], \end{aligned} \quad (83)$$

donde se ha tenido en cuenta (53). La expresión entre paréntesis [...] es un estado propio de H . Usando (70) y (71), la consideración explícita de sus condiciones de contorno en $\pm\infty$ indica que este estado propio es $|p^- \rangle$ ($p < 0$),

que continúa analíticamente $|p^+\rangle$ ($p > 0$) para momentos negativos. Como consecuencia, para valores grandes y positivos de x podemos escribir

$$\langle x|\psi(t)\rangle \sim \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x|p\rangle e^{-iE_p t/\hbar} \langle p|\psi(0)\rangle T(p), \quad (84)$$

y esto es todo lo que se requiere en muchas aplicaciones. La extensión del límite de la integral a $-\infty$ es un resultado notable y contrario a la intuición clásica. De hecho muchos autores truncan incorrectamente la integral en $p = 0$.

6.3 La transmitancia

La *transmitancia* $\mathcal{T}(\psi)$ es la probabilidad, para un estado dado ψ , de terminar con momento positivo en el futuro remoto. Excepto por el argumento usaremos la misma notación para esta cantidad y para el coeficiente de transmisión (correspondiente a un momento fijo), $T(p)$. $\mathcal{T}(\psi)$ y $T(p)$ están íntimamente relacionados como se demuestra más abajo. [Los argumentos se omitirán cuando el contexto clarifique cuál de las dos cantidades se está manejando.] Como la distribución de momentos de un estado asintótico ϕ_{sal} no cambia con el tiempo, la transmitancia puede escribirse como

$$\mathcal{T}(\psi) = \int_0^{\infty} dp \langle p|\phi_{\text{sal}}(0)\rangle \langle \phi_{\text{sal}}(0)|p\rangle \quad (85)$$

$$= \int_0^{\infty} dp \langle p^-|\psi(0)\rangle \langle \psi(0)|p^- \rangle. \quad (86)$$

Se obtiene una expresión sencilla suponiendo que a tiempo $t = 0$ el paquete de ondas no solapa con el potencial. En este caso se pueden introducir relaciones de cierre en el espacio de coordenadas y usar la expresión asintótica para el estado $|p^-\rangle$ a la izquierda. El resultado es

$$\mathcal{T}(\psi) = \int_0^{\infty} dp |\langle p|\psi(0)\rangle|^2 |T(-p)|^2 = \int_0^{\infty} dp |T(p)|^2 |\langle p|\psi(0)\rangle|^2, \quad (87)$$

donde se ha usado (53).

La probabilidad de terminar con momento positivo es igual a la probabilidad de acabar en la parte derecha del potencial. El estado ψ se comporta finalmente como un estado libre ϕ_{sal} , y puede demostrarse rigurosamente para el movimiento libre que cuando $t \rightarrow \infty$ [28],

$$\int_0^\infty dp |\phi_{\text{sal}}(p)|^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_a^\infty dx |\phi_{\text{sal}}(x)|^2 \quad (88)$$

$$\int_{-\infty}^0 dp |\phi_{\text{sal}}(p)|^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^a dx |\phi_{\text{sal}}(x)|^2 \quad (89)$$

para cualquier coordenada finita a .

Veamos otra interesante expresión para la transmitancia, como siempre suponiendo que el paquete está inicialmente a la izquierda de la barrera. El punto de partida es la *ecuación de continuidad*

$$\frac{\partial |\psi(x)|^2}{\partial t} = - \frac{\partial J(x, t)}{\partial x}, \quad (90)$$

donde

$$J(x, t) \equiv \frac{\hbar}{m} \text{Im} [\psi^*(x, t) \partial \psi(x, t) / \partial x] \quad (91)$$

es la densidad de corriente cuántica.

Integrando desde a hasta ∞ , y suponiendo $J(\infty, t) = 0$,

$$\frac{dN_+(a, t)}{dt} = J(a, t). \quad (92)$$

donde $N_+(a, t)$ es la norma a la derecha del punto a ,

$$N_+(a, t) = \int_a^\infty dx |\psi(x)|^2. \quad (93)$$

Finalmente, integrando de $t = 0$ a ∞ , y suponiendo $N_+(a, 0) = 0$ se obtiene

$$\mathcal{T}(\psi) = N_+(a, \infty) = \int_0^\infty dt J(a, t). \quad (94)$$

6.4 Una medida de la duración de la colisión: El tiempo de permanencia

La colisión de un paquete de ondas con una barrera de potencial queda descrita completamente por la evolución del paquete de ondas desde el estado asintótico de entrada hasta el de salida. Sin embargo no siempre es necesaria toda la información contenida en $\psi(x, t)$. En muchos casos unas pocas cantidades características resumen toda la información relevante del choque. Una de estas cantidades es la transmitancia (que corresponde en colisiones de más de una dimensión a la sección eficaz). Otro elemento importante es la *duración de la colisión*. La medida estándar de la duración de la colisión es el tiempo de *permanencia*, o tiempo *medio* de la colisión,

$$\tau_D(a, b; t_1, t_2; \psi) = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_a^b dx |\psi(x, t)|^2. \quad (95)$$

En principio las coordenadas $a, b > a$, y los instantes t_1 y $t_2 > t_1$ son arbitrarios pero normalmente a y b se eligen para abarcar la región de interacción (de forma que $V(x)$ sea cero o despreciable para $x < a$ y $b > a$), t_1 se toma como tiempo cero (un tiempo inicial de preparación en el que el paquete de ondas aún no ha chocado contra la barrera), y $t_2 = \infty$.

El tiempo de permanencia se ha medido mediante la técnica de fotoluminiscencia resuelta en el tiempo con un láser de picosegundos [29]; es además un parámetro importante para analizar el comportamiento de estructuras semiconductoras [30,31].

La interpretación de (95) como un tiempo medio de permanencia de la partícula en la región $[a, b]$ (donde el promedio se refiere a los miembros del colectivo asociado con ψ) no es obvia, puesto que no disponemos de trayectorias en la interpretación ortodoxa de la teoría cuántica. Sin embargo, existen varios argumentos formales que proporcionan (95) extendiendo al caso

cuántico el tiempo de permanencia clásico (por ejemplo mediante “integrales de caminos” de Feynmann, trayectorias causales o de Bohm, o como el valor esperado de un operador tiempo de permanencia). No insistiremos aquí en estas cuestiones enraizadas en la deficientemente entendida dualidad onda-corpúsculo; independientemente de una hipotética interpretación estadística del tiempo de permanencia en términos de los miembros del colectivo, aceptaremos el tiempo de permanencia como una cantidad característica del propio colectivo (estado ψ) que proporciona una definición razonable de la duración de la colisión, que al menos coincide con la expresión clásica.

Veamos con más detalle la analogía entre (95) y el tiempo de permanencia clásico. Si un colectivo estadístico de partículas clásicas (que no interaccionan entre sí), descrito por una distribución de probabilidad en el espacio de fases $f = f(p, q, t)$ normalizada a la unidad, colisiona con una barrera de potencial, el tiempo medio por partícula entre $q = a$ y $q = b$ puede escribirse como (las integrales de momento y posición van de $-\infty$ a ∞ , mientras que las integrales de tiempo van de 0 a ∞ si no se indica lo contrario):

$$\begin{aligned}\tau_D &= \iint f(q_0, p_0, 0) \tau(a, b, q_0, p_0) dq_0 dp_0 \\ &= \int dq_0 \int dp_0 \int f(q_0, p_0, 0) \{ \mathcal{H}[q(q_0, p_0, t) - a] - \mathcal{H}[q(q_0, p_0, t) - b] \} dt \\ &= \int dt \int dq \int f(q, p, t) [\mathcal{H}(q - a) - \mathcal{H}(q - b)] dp = \int dt \int_a^b \varrho(q) dq\end{aligned}\tag{96}$$

donde $\tau(a, b, q_0, p_0)$ es el tiempo entre a y b para la trayectoria con condiciones iniciales (q_0, p_0) , y $\mathcal{H}$ es la función de Heaviside, y (q, p) es la fase a tiempo t de la trayectoria que comienza at (q_0, p_0) a tiempo $t = 0$. De acuerdo con el teorema de Liouville $dqdp = dq_0dp_0$ y $f(q, p, t) = f(q_0, p_0, 0)$. En la ecuación (97), $\varrho(q)$ es la integral sobre momentos de la distribución $f(q, p)$, es decir, la densidad de probabilidad.

Usando la notación $Q = Q(a, b, t) = \int_a^b \varrho(x) dx$, el tiempo de permanencia se convierte en

$$\tau_D = \int Q(a, b, t) dt. \quad (97)$$

Integrando la ecuación de continuidad sobre x entre a y b , y sobre el tiempo entre 0 y t , Q toma la forma

$$Q(t) = \int_0^t [J(a, t') - J(b, t')] dt' = \int_0^t F(a, b, t') dt', \quad (98)$$

donde $J(x, t')$ es la densidad de corriente, $F(a, b) = J(a) - J(b)$, y se ha supuesto que $Q(0) = 0$. Sustituyendo (98) en (97),

$$\begin{aligned} \tau_D &= \int dt \int_0^t f(t') dt' = \int dt \int \mathcal{H}(t - t') f(t') dt' \\ &= \lim_{t'' \rightarrow \infty} \int_0^{t''} (t'' - t') f(t') dt' = \lim_{t'' \rightarrow \infty} \left[t'' Q(t'') - \int_0^{t''} t' f(t') dt' \right]. \end{aligned} \quad (99)$$

Si además $Q(t'')$ decae más rápido que t''^{-1} [54] el tiempo de permanencia (97) toma la forma local (en [32] puede encontrarse una derivación alternativa)

$$\tau_D(a, b) = \int [J(b, t') - J(a, t')] t' dt'. \quad (100)$$

Supongamos que a y b son tales que

$$\int J(b, t') dt' = \mathcal{T}, \quad \int_0^{t_c} J(a, t') dt' = 1, \quad \int_{t_c}^{\infty} J(a, t') dt' = -\mathcal{R} \quad (101)$$

para al menos un instante t_c . Físicamente el paquete de ondas pasa a través de a completamente antes del tiempo t_c , y después de cierta duración con flujo despreciable la parte reflejada vuelve con una corriente negativa. En este caso (100) puede escribirse como

$$\tau_D = \mathcal{T} \langle t \rangle_b^{\text{sal}} - \langle t \rangle_a^{\text{ent}} + \mathcal{R} \langle t \rangle_a^{\text{sal}} \quad (102)$$

donde

$$\langle t \rangle_b^{\text{sal}} = \frac{\int J(b, t') t' dt'}{\int J(b, t') dt'} \quad (103)$$

$$\langle t \rangle_a^{\text{ent}} = \int_0^{t_c} J(a, t') t' dt' \quad \langle t \rangle_a^{\text{sal}} = \frac{-\int_{t_c}^{\infty} J(a, t') t' dt'}{\int_{t_c}^{\infty} |J(a, t')| dt'} \quad (104)$$

En cada caso el instante medio de paso se obtiene normalizando la distribución de tiempos de paso. Teniendo en cuenta que $\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1$,

$$\tau_T = \langle t \rangle_b^{\text{sal}} - \langle t \rangle_a^{\text{ent}}, \quad \tau_R = \langle t \rangle_a^{\text{sal}} - \langle t \rangle_a^{\text{ent}} \quad (105)$$

Seguindo las referencias [33] y [34] se puede ver que las cantidades τ_T y τ_R tienden en el límite de distribuciones de momento muy estrechas a promedios de “tiempos de fase” definidos en la siguiente sección. Sin embargo, no coinciden en general con estos promedios, ni son necesarios estos paquetes de ondas especiales para su definición, sólo se requiere que exista un instante t_c .

6.5 Importancia de las fases. Retardos. Tiempos de llegada

Si no hay estados ligados, puede obtenerse el potencial por inversión a partir de la matriz S o una de las amplitudes R^l or R^r en función del momento. Sin embargo, el conocimiento de los módulos, es decir de las probabilidades o coeficientes de transmisión y reflexión, no es suficiente. Las fases son también necesarias, y se asocian a propiedades observables con información sobre la dependencia temporal de la colisión. En esta sección usaremos ideas y resultados de las referencias [35-41].

Consideremos un paquete de ondas que incide desde la izquierda y choca contra una barrera (de 0 a d), y tomemos un intervalo espacial $[a, b]$ más amplio que la barrera. A tiempo cero el estado es, en representación de

coordenadas,

$$\psi(x, 0) = \left[\frac{1}{2\pi\delta^2} \right]^{1/4} \exp \left[ip_c x / \hbar - (x - x_c)^2 / (4\delta^2) \right]. \quad (106)$$

Está centrado en la posición x_c y momento $p_c = \hbar k_c$. Su representación de momentos se denota como $\phi_0(p)$. La distribución de momentos inicial es $f(p) = |\phi_0(p)|^2$, una distribución Gaussiana con varianza $\sigma^2 = [\hbar/(2\delta)]^2$. Lejos de la barrera, a la derecha,

$$\psi_T(x >> x_2, t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \int_0^\infty dp \phi_0(p) T(p) e^{i(px - Et)/\hbar}, \quad (107)$$

y la izquierda, después de la colisión,

$$\psi_R(x << x_1, t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \int_0^\infty dp \phi_0(p) R^l(p) e^{-i(px + Et)/\hbar}. \quad (108)$$

Hay un término adicional $\Psi_I(x << x_1, t)$, que describe la onda incidente. Antes de la colisión, para el cálculo de $\langle t \rangle_a^{\text{ent}}$, el efecto de Ψ_R y su interferencia con Ψ_I puede ignorarse. Después de la colisión, puede despreciarse Ψ_I para evaluar $\langle t \rangle_a^{\text{sal}}$, siempre que a sea una posición asintótica.

Substituyendo las expresiones (106), (107) y (108) en los promedios temporales y haciendo uso de la delta de Dirac se obtiene

$$\langle t \rangle_b^{\text{sal}} = \frac{1}{T} \int_0^\infty dp |\phi_0(p)|^2 |T(p)|^2 \frac{m}{p} \left[b - x_c + \hbar \frac{d\Phi_T(p)}{dp} \right] \quad (109)$$

y

$$\langle t \rangle_a^{\text{sal}} = \frac{1}{R} \int_0^\infty dp |\phi_0(p)|^2 |R^l(p)|^2 \frac{m}{p} \left[-a - x_c + \hbar \frac{d\Phi_R(p)}{dp} \right] \quad (110)$$

La cantidad $\tau_T^{Ph}(p) \equiv m[b - x_c + \hbar \Phi_T'(p)]/p$, se compone de un tiempo que emplearía una partícula clásica con masa m y momento $\hbar p$ en ir de x_c to b , más un *retardo de tiempo de fase* $m\hbar\alpha'(p)/p$. [De forma similar, el término

entre paréntesis en (110) es un tiempo que emplea la partícula en viajar libremente de x_c a $x = a$, con un cambio de signo instantáneo en $x = 0$, más un retardo. La integral da un promedio para el instante de llegada de la onda reflejada.] Por tanto, el tiempo de llegada $\langle t \rangle_b^{tal}$ puede verse como el promedio de los tiempos de fase $\tau_T^{Ph}(p)$ sobre una pseudo probabilidad condicional de comenzar con momento p habiendo sido transmitido. (La evaluación del segundo momento proporciona términos adicionales sin interpretación semiclásica inmediata.) Usando ψ_I se obtiene

$$\langle t \rangle_a^{ent} = \int_0^\infty dp |\phi_0(p)|^2 \frac{m(a - x_c)}{p}. \quad (111)$$

La interpretación de estas cantidades como tiempos de llegada puede justificarse mediante modelos fenomenológicos de detectores (potenciales complejos absorberes) [42].

La relación (109) es apropiada para examinar el “efecto Hartman” [43,44]. Hartman [43] estudió la evolución de un paquete de ondas con distribución de momentos centrada en p_c , chocando contra una barrera rectangular de altura $V_0 > p_c^2/(2m)$, y anchura d . Encontró tres regiones que dependen del valor de d (véase también [45]). Para barreras anchas (opacas), los tiempos de fase asociados con k , por debajo de la barrera, tienden a una constante independiente de d , $2m/(\hbar k \kappa)$, donde $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}$. Cuando las componentes de momento por debajo de la barrera dominan la transmisión, el paquete de ondas transmitido parece atravesar la región del potencial en un intervalo de tiempo independiente de d . (“efecto Hartman”). Sin embargo, si el valor de d es muy grande (barrera ultra-opaca) las ondas planas con momentos por encima de la barrera dominan la transmisión, y resulta un comportamiento clásico, es decir, el tiempo crece linealmente con d . Finalmente, para anchuras pequeñas, el tiempo de fase depende en general de d .

Consideremos un paquete inicial Gaussiano (106) con el centro en $x = x_c$ y anchura espacial δ . Una estimación del valor de d que da la transición entre el efecto Hartman y el comportamiento cuasiclásico para obtenerse para cada valor de δ igualando el factor $|T(p)|^2 |\phi_0(p)|^2$ correspondiente a $p = p_c$ y $p = p_r$, donde p_r es el momento de la primera resonancia por encima de la barrera. Este procedimiento lleva a una curva que separa los comportamientos cuántico y cuasiclásico,

$$\delta = \frac{\hbar \sqrt{-\ln |T(p_c)|}}{|p_r - p_c|} \approx \frac{\hbar \sqrt{\kappa_c d}}{|p_r - p_c|}, \quad (112)$$

donde $\kappa_c = \sqrt{2mV_0 - p_c^2}$. Para δ fijo, la transición es más abrupta a δ mayores como consecuencia de la distribución de momentos más estrecha.

Un punto de vista complementario lo da la matriz de tiempo de retardo en la capa de energía propuesta por Smith [46],

$$Q(E) = -i\hbar S(E)^\dagger \frac{dS(E)}{dE}, \quad (113)$$

cuyos elementos diagonales son los tiempos de retardo para reflexión y transmisión. Se llega a esta expresión substrayendo los tiempos de permanencia con y sin potencial [46,47]. La traza de (113) se relaciona con el cambio de la densidad de estados $\Delta\rho(E) \equiv \text{Tr}[\delta(E - H) - \delta(E - H_0)]$, que es una cantidad fundamental para caracterizar el espectro continuo [48], de acuerdo con el “teorema espectral”,

$$\Delta\rho(E) = -\pi^{-1} \Im \text{Tr}[G(E + i0) - G_0(E + i0)] \quad (114)$$

$$= \frac{1}{h} \sum_{j=1,2} Q(E)_{jj} = \pi^{-1} \frac{d\Phi_T(E)}{dE}. \quad (115)$$

Las versiones de ondas parciales y multicanal del teorema espectral se han probado rigurosamente [49] pero no conocemos ninguna derivación rigurosa

en una dimensión, aunque la justificación sigue presumiblemente líneas similares. El resultado para una dimensión en términos de la fase de la amplitud de transmisión se ha formulado en [50] con argumentos plausibles que siguen a la referencia [51], y se ha confirmado con ejemplos explícitos [52]. La última expresión en la ecuación (115) se obtiene de la traza previa sobre Q usando las relaciones (70) y (74). Una derivación relativamente simple se obtiene siguiendo el razonamiento presentado en [53] para el caso tridimensional, y teniendo en cuenta los desfases apropiados para el caso monodimensional, (77) y (78).

6.6 Comportamiento a tiempos grandes

En esta sección consideraremos que el estado inicial $\psi(x, 0)$ puede o no solapar con el potencial a tiempo $t = 0$ como corresponde a un problema de decaimiento o a uno de colisión, respectivamente. Supondremos por simplicidad que no hay estados ligados, y $t > 0$ en todas las ecuaciones.

Para discutir el comportamiento a tiempos grandes de la densidad de probabilidad se requiere la expresión del propagador en el plano complejo q ,

$$\langle x | e^{-iHt/\hbar} | x' \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_C dq I(q) e^{-izt/\hbar} \quad (116)$$

$$I(q) = \frac{q}{m} \langle x | \frac{1}{z - H} | x' \rangle, \quad (117)$$

donde $z \equiv q^2/2m$ y el contorno C va de $-\infty$ a $+\infty$ por encima de todas las singularidades de la resolvente. En ausencia de estados ligados C va por encima del eje real, donde se localiza el espectro continuo de H . Debido a la exponencial $e^{-izt/\hbar}$ en (116) el comportamiento cuando $t \rightarrow \infty$ está dominado por la región en torno al origen, que es de hecho un punto de silla del camino de máxima pendiente de descenso de este factor exponencial. El

camino cruza el origen a lo largo de la diagonal de los cuadrantes segundo y cuarto. Introduciendo la variable auxiliar

$$u = q/f, \quad f = (1-i)\sqrt{(m\hbar/t)}, \quad (118)$$

la exponencial se transforma en e^{-u^2} , y u permanece real a lo largo del camino de máxima pendiente.

El elemento de matriz de la resolvente $\langle x|(z-H)^{-1}|x'\rangle$ que se define para $\Im m q > 0$ (o primera hoja de la energía) debe continuarse analíticamente en el semiplano inferior q (o segunda hoja del plano complejo z) para que este tipo de análisis pueda realizarse. Esto es válido en particular para potenciales de soporte finito. Si la función continuada analíticamente es analítica en el origen, posee una serie de Taylor

$$\langle x|(z-H)^{-1}|x'\rangle = a_0 + a_1 q + a_2 q^2 + \dots \quad (119)$$

con coeficientes a_i que dependen de x y x' . Pero debido al factor (impar) q en (117), el primer término, a_0 , no contribuye a la integral (116). La fórmula asintótica para el propagador se origina por tanto en el segundo término y toma la forma

$$\langle x|e^{-iHt/\hbar}|x'\rangle \sim \frac{i}{2m\pi} a_1 f^3 \int du u^2 e^{-u^2} = \frac{1-i}{2m\sqrt{\pi}} a_1 \left(\frac{m\hbar}{t}\right)^{3/2} \quad (120)$$

Pueden darse contribuciones exponenciales debidas a los polos, pero no afectan a este resultado asintótico. Cuando $I(0)$ se hace cero aparece un comportamiento asintótico t^{-3} de la densidad de probabilidad.

Mediante la descomposición de la resolvente de H

$$\frac{1}{z-H} = \frac{1}{z-H_0} + \frac{1}{z-H_0} V \frac{1}{z-H} \quad (121)$$

$$= \frac{1}{z-H_0} + \frac{1}{z-H_0} T_{\text{op}}(z) \frac{1}{z-H_0}, \quad (122)$$

el operador de evolución $U \equiv e^{-iHt/\hbar}$ se separa en parte “libre” y “de difusión”, $U = U_l + U_d$.

$$\langle x|U_l|x'\rangle \equiv \langle x|e^{-iH_0t/\hbar}|x'\rangle = \frac{i}{2\pi} \int dq e^{-izt/\hbar} I_l(q) \quad (123)$$

$$I_l(q) = \frac{q}{m} \langle x|\frac{1}{z - H_0}|x'\rangle \quad (124)$$

$$\langle x|U_d|x'\rangle \equiv \langle x|e^{-iHt/\hbar} - e^{-iH_0t/\hbar}|x'\rangle = \frac{i}{2\pi} \int dq e^{-izt/\hbar} I_c(q) \quad (125)$$

$$I_d(q) = \frac{q}{m} \langle x|\frac{1}{z - H_0} T_{\text{op}}(z) \frac{1}{z - H_0}|x'\rangle. \quad (126)$$

Pueden discutirse dos tipos de movimiento en una dimensión, movimiento en la recta real completa y en el semieje positivo. Mientras que en presencia de un potencial en los dos casos encontramos la dependencia t^{-3} el movimiento libre es diferente. Consideremos primero el movimiento libre sobre la recta real. Usando la resolución de la identidad en términos de estados propios del momento e integrales de contorno se encuentra que

$$\langle x|\frac{1}{z - H_0}|x'\rangle = \frac{-im}{q\hbar} e^{i|x-x'|q/\hbar}, \quad (127)$$

de manera que $I_l(0) = -i/\hbar \neq 0$, véase (124). Como consecuencia el comportamiento asintótico de la densidad de probabilidad para el movimiento libre en la recta real es t^{-1} . Este es un caso importante en el que no se satisface la ecuación (119). Explícitamente, efectuando la integral en (116), se obtiene el conocido propagador

$$\langle x|e^{-iH_0t/\hbar}|x'\rangle = \left(\frac{m}{i\hbar t}\right)^{1/2} e^{im(x-x')^2/2\hbar t}. \quad (128)$$

El análisis efectuado con varios potenciales modelo indica que la parte los términos libre y de difusión se cancelan, $I_d(0) = i/\hbar = -I_l(0)$ [54,55].

De diferente naturaleza es el movimiento libre restringido al semieje positivo, $r > 0$. Un conjunto completo y ortogonal para este caso viene dado

por

$$\langle r|p\rangle = \frac{2}{h^{1/2}} \sin(pr/\hbar), \quad r > 0, \quad p > 0, \quad (129)$$

que son las funciones propias de H_0 , con valor propio $p^2/2m$, normalizadas según $\int_0^\infty \langle p|r\rangle \langle r|p'\rangle dr = \delta(p - p')$. La función de Green puede escribirse ahora como

$$\langle r|\frac{1}{z - H_0}|r'\rangle = \frac{mi}{\hbar q} \left[e^{i(r+r')q/\hbar} - e^{i|r-r'|q/\hbar} \right]. \quad (130)$$

[Obsérvese la amplitud adicional en comparación con el resultado obtenido para movimiento libre sobre la recta real completa (127)]. I_l es, según (130),

$$I_l(q) = \frac{i}{\hbar} \left[e^{i(r+r')q/\hbar} - e^{i|r-r'|q/\hbar} \right] \quad (131)$$

que se anula en el límite $q \rightarrow 0$, lo que lleva a un comportamiento asintótico t^{-3} de la densidad de probabilidad en contraste con la dependencia t^{-1} del movimiento libre en la recta real. Explícitamente, el propagador es en este caso

$$\langle r|U_l|r'\rangle = \left(\frac{m}{i\hbar t} \right)^{1/2} \left[e^{i(r-r')^2 m/2\hbar t} - e^{i(r+r')^2 m/2\hbar t} \right]. \quad (132)$$

En los modelos analíticos examinados se cumple que $I_d(0) = I_l(0) = 0$ de forma que la densidad de probabilidad se comporta también asintóticamente como t^{-3} .

En resumen, en las colisiones en la recta real la combinación de contribuciones libre y de difusión cancela el término t^{-1} , por lo cual la dependencia dominante de la densidad de probabilidad es t^{-3} . En ningún caso el mecanismo que explica esta dependencia es aisladamente el movimiento libre como se ha llegado a sugerir [56]. En el semieje $r > 0$ las dos componentes (libre y de difusión) tienen asintóticamente la dependencia dominante t^{-3} . Podría darse la dependencia t^{-1} si hubiera una singularidad en el origen. En el caso $-\infty < x < \infty$ un polo simple yace en el origen en ausencia de potencial

pero un potencial débil desplaza esta singularidad. Para valores arbitrarios del potencial sólo en casos excepcionales se encontrará el polo a energía cero. En colisiones de ondas parciales de tipo “s” las singularidades en el origen se conocen como resonancias de energía cero [12].

6.7 Comportamiento a tiempos cortos

El decaimiento de estados inestables se ha estudiado de muchas maneras [57]. Una descripción ideal permitiría entender tanto el régimen exponencial dominante como las desviaciones del mismo. Se ha progresado en esta dirección representando la *amplitud de supervivencia* $A(t, \psi) \equiv \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle$ como una suma discreta sobre términos resonantes [58,59].

Aquí discutimos el comportamiento a tiempos cortos del decaimiento de la probabilidad de supervivencia de estados cuánticos $S = |A|^2$. Varios autores han descrito una dependencia a tiempos cortos t^2 de la probabilidad de decaimiento $P_{\text{dec}} \equiv 1 - S$ siempre que existan la energía media y el segundo momento, véanse por ejemplo los artículos relacionados con la “paradoja de Zenon cuántica” [60]. Se ha prestado menos atención al caso en el que estas condiciones no se satisfacen. Por otro lado Moshinsky y colaboradores sugieren una dependencia $t^{1/2}$ de la probabilidad de decaimiento a tiempos cortos [61-62]. Veamos cómo se resuelve la aparente contradicción.

Cuando el operador de evolución se expresa en términos de la resolvente, $A(t, \psi)$ toma la forma

$$A(t, \psi) = \langle \psi | e^{-iHt/\hbar} | \psi \rangle = \frac{i}{2\pi m} \int_C dq q \langle \psi | \frac{e^{-izt/\hbar}}{z - H} | \psi \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_C dq e^{-izt/\hbar} M(q), \quad (133)$$

donde $z = q^2/(2m)$, y el contorno C va de $-\infty$ a $+\infty$ pasando por encima

de todas las singularidades de la resolvente. La función

$$M(q) \equiv \frac{q}{m} \langle \psi | \frac{1}{z - H} | \psi \rangle \quad (134)$$

puede evaluarse en el semiplano superior q , y luego ser continuada analíticamente al semiplano inferior. Si la continuación existe, $M(q)$ tiene en general un conjunto de singularidades de *core*, que dependen sólo del potencial, más posiblemente otras singularidades *estructurales* que dependen del estado particular ψ .

Es útil deformar el contorno original de integración a la diagonal D de los cuadrantes segundo y cuarto del plano q para identificar las dependencias más importantes y por ser ventajoso computacionalmente.

Supongamos que es posible un desarrollo de la forma

$$M(q) = \sum_k \frac{a_k}{(q - q_k)}, \quad \Im m q_k < 0 \quad (135)$$

(polos de orden superior pueden tratarse de forma similar). Aquí $k = 1, 2, 3 \dots$ son los índices de los polos. Al deformar el contorno C al contorno D , los polos cruzados q_k proporcionan contribuciones “resonantes” a $A(t)$ que decaen exponencialmente con el tiempo (La colisión “resonante” se analiza con técnicas basadas en el plano complejo en [63]),

$$E_k(t) = a_k e^{-iq_k^2 t / (2m\hbar)} = a_k e^{-u_k^2}, \quad (136)$$

donde

$$u_k \equiv q_k / f, \quad f \equiv (1 - i) \sqrt{(m\hbar/t)}. \quad (137)$$

Independientemente de ser cruzados o no por la deformación de un contorno todos los polos contribuyen, debido a la integral a lo largo de una diagonal. Cada contribución se expresa en términos de la función w , véase [64], como

$$D_k(t) = -\frac{a_k}{2} \text{sign}(\Im m u_k) w[\text{sign}(\Im m u_k) u_k]. \quad (138)$$

El término exponencial (136) puede añadirse e esta contribución para dar el resultado compacto [64],

$$A(t) = \sum_k [E_k(t) + D_k(t)] = \sum_k \frac{1}{2} a_k w(-u_k). \quad (139)$$

(Se sobreentiende que $E_k(t) = 0$ para polos no cruzados al deformar el contorno). En la primera forma de (139), el decaimiento exponencial en E_k queda separado claramente de la “corrección” D_k . Sin embargo la expresión compacta es muy útil para estudiar el comportamiento a tiempos pequeños.

La serie de Taylor de la función w [64] da una serie de potencias en $t^{1/2}$,

$$A(t) = \sum_k \frac{a_k}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[2^{-1} q_k (1-i)(t/m\hbar)^{1/2}]^n}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)}. \quad (140)$$

Esto sugiere una dependencia $t^{1/2}$ de la probabilidad de decaimiento, como mantienen Moshinsky y colaboradores [61-62]. Por otro lado, la serie formal basada en desarrollar el operador de evolución,

$$A(t, \psi) = \langle \psi | e^{-iHt/\hbar} | \psi \rangle = 1 - \frac{it}{\hbar} \langle \psi | H | \psi \rangle - \frac{t^2}{2\hbar^2} \langle \psi | H^2 | \psi \rangle + \dots, \quad (141)$$

proporciona una dependencia t^2 ,

$$P_{\text{dec}} = \frac{t^2}{\hbar^2} (\langle \psi | H^2 | \psi \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle^2) + \dots. \quad (142)$$

Sin embargo, los valores medios de H y/o potencias superiores de H pueden no existir. Son posibles varios comportamientos dependiendo de la existencia de estos momentos. La cuestión de la posible existencia física de estados con momentos primero o segundo infinitos es un asunto controvertido [65]. En principio, si son estados en el espacio de Hilbert, son estados válidos físicamente de acuerdo con la interpretación estándar del formalismo cuántico. Lamb propuso experimentos idealizados para crear estados arbitrarios [66] mediante la creación de potenciales adecuados. Las actuales técnicas

de epitaxia de haces moleculares permiten el crecimiento de estructuras con formas de potencial muy flexibles [67], y proporcionan una vía para acercarse a los experimentos ideales de Lamb. En cualquier caso, si los momentos no son estrictamente infinitos pero suficientemente grandes, el presente análisis seguiría siendo válido en cierta escala de tiempo.

Consideremos las dos primeras derivadas de A a tiempo $t = 0$ primero a partir de (141), y suponiendo luego una dependencia de la forma $A \sim 1 + b t^c$, donde b y c son constantes finitas,

$$\left. \frac{dA}{dt} \right|_{t=0} = \frac{-i}{\hbar} \langle \psi | H | \psi \rangle = b c t^{c-1} \big|_{t=0} \quad (143)$$

$$\left. \frac{dA^2}{dt^2} \right|_{t=0} = -\frac{1}{\hbar^2} \langle \psi | H^2 | \psi \rangle = b c (c-1) t^{c-2} \big|_{t=0}. \quad (144)$$

Si los momentos primero y/o segundo son infinitos los valores posibles de c están restringidos. En la siguiente tabla el comportamiento de la columna de la derecha es posible en principio cuando se satisface la condición de la columna izquierda,

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \infty \quad P_{\text{dec}} \sim t^{1/2} \quad (145)$$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle < \infty \text{ and } \langle \psi | H^2 | \psi \rangle = \infty \quad P_{\text{dec}} \sim t^{3/2} \quad (146)$$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle < \infty \text{ and } \langle \psi | H^2 | \psi \rangle < \infty \quad P_{\text{dec}} \sim t^2 \quad (147)$$

Pueden encontrarse ejemplos de comportamiento $t^{1/2}$, $t^{3/2}$ and t^2 a tiempos cortos de P_{dec} en [68]. Cuando la probabilidad de decaimiento se comporta como $t^{3/2}$ or t^2 los coeficientes de potencias inferiores de t se anulan por las cancelaciones entre los diferentes polos.

7 Potenciales complejos

Los potenciales complejos con parte imaginaria no nula aparecen de forma natural en colisiones “multicanal” al tratar de encontrar una ecuación efectiva para el canal de interés (típicamente el canal elástico) [12]. El canal seleccionado tendrá fuentes o sumideros físicos que pueden modelarse con un potencial complejo. Los potenciales complejos sirven también como modelos de detectores, y se usan en tratamientos fenomenológicos de sistemas disipativos. Además, los potenciales complejos tienen una importante aplicación en propagaciones numéricas como absorbentes de paquetes de ondas en los bordes de la “caja” espacial finita en la que se confina al sistema.

7.1 Formalismo

En el caso hermitico, la evolución hacia adelante en el tiempo de $\psi(t_1)$ a $\psi(t_2)$ viene dada por $U(t_2; t_1) = \exp[-iH(t_2 - t_1)/\hbar]$, ($t_2 > t_1$), y hacia atrás por $U^\dagger(t_2, t_1) = \exp[iH(t_1 - t_2)]$. U es unitario y en una operación sucesiva de los dos operadores su efecto se cancela. Para un Hamiltoniano no hermitico $U(t_2; t_1)$ no es unitario, ya que H no preserva la norma. Sin embargo se puede recobrar el estado inicial si el movimiento hacia atrás se realiza con el Hamiltonian dual $H^\dagger$. Definiendo la evolución hacia adelante bajo este Hamiltoniano mediante $\hat{U}(t_2, t_1) = \exp[-iH^\dagger(t_2 - t_1)/\hbar]$, y hacia atrás por $\hat{U}^\dagger(t_2, t_1) \exp[iH(t_2 - t_1)/\hbar]$ encontramos

$$\hat{U}^\dagger(t_2; t_1)U(t_2, t_1) = 1. \quad (148)$$

Es importante tener presente para discusiones posteriores que si el movimiento hacia adelante y hacia atrás corresponden a la acción física del Hamiltoniano H , la exponencial para evolución hacia atrás en el tiempo se escribe en términos de $H^\dagger$. Este punto se presta fácilmente a confusión.

Las anteriores consideraciones permiten generalizar al caso no hermítico la unitariedad del operador de evolución (para Hamiltonianos hermíticos el símbolo $\hat{\cdot}$ es irrelevante) e indican que podemos esperar también generalizaciones de las relaciones usuales de la teoría de colisiones empleando H , $H^\dagger$ y sus funciones propias.

La teoría de colisiones para Hamiltonianos no hermíticos podría formularse de acuerdo con diferentes convenciones de notación. Nosotros conservaremos formalmente la estructura del operador S y la relación entre estados $|p^+\rangle$ y $|p^-\rangle$ a través del operador de inversión temporal. En particular, el operador de Möller Ω_+ se define como en el caso hermítico, y admite la misma interpretación, pero Ω_- viene dado por

$$\Omega_- = \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{iH^\dagger t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar}, \quad (149)$$

así que el movimiento hacia atrás en el tiempo que implica la segunda exponencial viene también determinado por H . De esta forma los estados $|p^-\rangle$ se definen ahora mediante

$$|p^-\rangle = \Omega_- |p\rangle = |p\rangle + \frac{1}{E_p + i0 - H^\dagger} V^\dagger |p\rangle. \quad (150)$$

(Son estados propios de $H^\dagger$.) El operador S que conecta el estado saliente con el entrante (de acuerdo con la evolución debida a H) viene dado de la forma habitual como $S = \Omega_-^\dagger \Omega_+$. La colisión no preserva la norma y S no puede ser unitario. Sin embargo, un argumento similar al del comienzo de esta sección indica que la relación de unitariedad para S en el caso hermítico se generaliza introduciendo un operador de Möller que conecta los estados asintóticos con el estado $\hat{\psi}$ que evoluciona con $H^\dagger$,

$$\hat{\Omega}_+ = \lim_{t \rightarrow \infty} e^{iH^\dagger t/\hbar} e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (151)$$

$$\hat{\Omega}_- = \lim_{t \rightarrow \infty} e^{iH^\dagger t/\hbar} e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (152)$$

Las relaciones (28) y (29) se convierten en

$$\hat{\Omega}^\dagger \Omega_+ = 1_{\text{op}} \quad (153)$$

$$\hat{\Omega} \Omega_+^\dagger = 1_{\text{op}} - \Lambda. \quad (154)$$

Los estados $|p^\pm\rangle$ tienen *compañeros biortogonales* $|\hat{p}^\pm\rangle$ (se obtienen formalmente a partir de las expresiones para $|p^\pm\rangle$ intercambiando H por $H^\dagger$ y viceversa),

$$|\hat{p}^+\rangle = |p\rangle + \frac{1}{E_p + i0 - H^\dagger} V^\dagger |p\rangle \quad (155)$$

$$|\hat{p}^-\rangle = |p\rangle + \frac{1}{E_p - i0 - H} V |p\rangle \quad (156)$$

$$\langle \hat{p}'^\pm | p^\pm \rangle = \delta(p' - p), \quad (157)$$

de forma que la unidad se expresa ahora en términos de una resolución biortogonal,

$$1_{\text{op}} = \sum \Lambda + \int dp |p^+\rangle \langle \hat{p}^+|. \quad (158)$$

El operador $\hat{S}$ para movimiento bajo $H^\dagger$ es $\hat{S} = \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+$, y la relación que generaliza la unitariedad de S es

$$1 = \hat{S}^\dagger S. \quad (159)$$

Las amplitudes de transmisión y reflexión para los estados propios de H , $|p^+\rangle$ y $|\hat{p}^-\rangle$ se escriben como es habitual (T, R) , mientras que las de los estados propios de $H^\dagger$ se indican mediante $\hat{T}, \hat{R}$.

Definiendo el operador parametrizado

$$\hat{T}(z) = V^\dagger + V^\dagger \frac{1}{z - H^\dagger} V^\dagger \quad (160)$$

los resultados de la sección 5.1 pueden generalizarse fácilmente. En particular las ecuaciones para las amplitudes R y T siguen siendo válidas y se obtiene un

conjunto paralelo de relaciones mediante las substitutiones $R \rightarrow \hat{R}$ y $T \rightarrow \hat{T}$. Usando el operador de inversión temporal se obtiene que $T^r = T^l = T$, $\hat{T}^r = \hat{T}^l = \hat{T}$ y

$$T(-p)^* = \hat{T}(p) \quad (161)$$

$$R^{r,l}(-p)^* = \hat{R}^{r,l}(p). \quad (162)$$

La relación de unitariedad generalizada (159) implica

$$T(p)\hat{T}(p)^* + R^{r,l}(p)[\hat{R}^{r,l}(p)]^* = 1 \quad (163)$$

$$\hat{R}^r(p)^*T(p) + \hat{T}(p)^*R^l(p) = 0, \quad p \text{ real}. \quad (164)$$

Una consecuencia inmediata es que el estado dependiente del tiempo

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \int dp \langle x|p^\pm\rangle e^{-iE_p t/\hbar} \langle \hat{p} \pm |\psi(0)\rangle, \quad (165)$$

viene dado por la misma expresión formal que en el caso hermítico.

Un tratamiento diferente del presentado aquí, basado en la analogía con las colisiones de "ondas parciales" para potenciales pares puede encontrarse en [23].

7.2 Absorbentes

Los potenciales absorbentes son modelos de detectores y sirven para eliminar los efectos espúreos de las paredes en cálculos numéricos. Por tanto es importante examinar algunas de sus propiedades. Supongamos que además del potencial complejo V_A existe otra interacción real V . Podemos definir un potencial absorbente como aquel para el que la norma de cualquier estado disminuye o se mantiene constante con el tiempo,

$$\frac{dN}{dt} \leq 0, \quad \text{para todo } t. \quad (166)$$

Es fácil comprobar mediante la ecuación de continuidad que una condición suficiente para satisfacer (166) es que la parte imaginaria del potencial V_A sea negativa (o cero) para todo x .

Un criterio alternativo se basa en la anulación de los coeficientes (y por tanto las amplitudes) de reflexión y transmisión para V_A ,

$$R(p) = 0 \quad (167)$$

$$T(p) = 0 \quad (168)$$

Una forma de asegurar (168) es imponer una barrera infinita en el punto $x = L$. Si el potencial complejo tiene soporte finito, por ejemplo entre $x = 0$ y $x = L$ la condición (167) implica que *la función de onda a la izquierda, $x < 0$, es igual a la función que existiría con el potencial V truncado en $x = 0$* . Este resultado es significativo puesto que una de las propiedades peculiares de la evolución cuántica de paquetes de onda es que una superposición de ondas estacionarias con momento positivo puede dar lugar a flujos negativos a tiempos especiales [69]. Este efecto es en general pequeño o despreciable pero un V_A estrictamente compatible con (167) debería dar cuenta de esta posible densidad de corriente negativa. Si se cumple (167) podemos igualar la derivada con respecto al tiempo de la norma a la izquierda con el flujo en $x = 0$,

$$\frac{dN^-}{dt} = J(x = 0, t). \quad (169)$$

Esta expresión justifica operacionalmente (en términos de una medida con un detector ideal) la definición de tiempos de llegada discutidos en la sección 6.5.

Otras propiedades deseables para un potencial absorbente, sobre todo para las aplicaciones en cálculos numéricos, son (i) anchura del potencial L pequeña, y (ii) “robustez” frente a discretizaciones. La investigación en

este campo se dirige a encontrar potenciales que se acerquen tanto como sea posible a las anteriores condiciones mediante métodos variacionales o de inversión [70].

8 Niveles asintóticos diferentes

Otra importante generalización del caso sencillo expuesto entre las secciones 3 y 6, ocurre cuando $V(x)$ tiende a valores asintóticos diferentes en los límites $x \rightarrow \pm\infty$, V_r y V_l respectivamente. Esta asimetría es físicamente significativa en varias circunstancias. Por ejemplo, si se aplica una diferencia de potencial entre los extremos de la doble barrera de un diodo basado en el efecto túnel resonante, se crea un salto en el potencial. Este salto puede ajustarse para controlar la corriente que pasa a través de la estructura y lograr máximos o mínimos de corriente. También los modelos simplificados de reacciones químicas endo- o exo-térmicas presentan la asimetría correspondiente a los distintos niveles de energía de los valles de reactivos y productos en las superficies de Born-Oppenheimer para el movimiento nuclear.

Discutiremos la forma asintótica de las soluciones generalizando la sección 5 y las relaciones para las amplitudes que se derivan de los Wronskianos. Para una energía $E > \max(V_r, V_l)$ existen dos soluciones degeneradas linealmente independientes,

$$\frac{1}{h^{1/2}} \begin{cases} \exp(ip_l x/\hbar) + R^l(p_l) \exp(-ip_l x/\hbar), & \text{si } x \sim -\infty \\ T^l(p) \exp(ip_r x/\hbar), & \text{si } x \sim \infty, \end{cases} \quad (170)$$

$$\frac{1}{h^{1/2}} \begin{cases} T^r(p_r) \exp(-ip_l x/\hbar), & \text{si } x \sim -\infty \\ \exp(-ip_r x/\hbar) + R^r(p_r) \exp(ip_r x/\hbar), & \text{si } x \sim \infty. \end{cases} \quad (171)$$

donde $p_r = [2m(E - V_r)]^{1/2}$ y $p_l = [2m(E - V_l)]^{1/2}$. Para valores positivos de p_r y p_l , representan los estados $|p_l^+\rangle$ y $|-p_r^+\rangle$ respectivamente. Para valores

negativos, $|p_l^- \rangle$ y $|-p_r^- \rangle$. Estos pueden obtenerse de los anteriores mediante conjugación compleja de forma que las relaciones (53) siguen siendo válidas. Como el Wronskiano es constante encontramos

$$\frac{i\hbar\hbar}{2} W(\langle x|p_l^+ \rangle, \langle x|-p_l^- \rangle) = p_l(1 - |R^l|^2) = p_+ |T^l|^2 \quad (172)$$

$$\frac{i\hbar\hbar}{2} W(\langle x|-p_r^+ \rangle, \langle x|p_r^- \rangle) = -p_l |T^r|^2 = -p_r(1 - |R^r|^2) \quad (173)$$

$$\frac{i\hbar\hbar}{2} W(\langle x|p_l^+ \rangle, \langle x|-p_r^+ \rangle) = p_l T^r = p_r T^l \quad (174)$$

$$\frac{i\hbar\hbar}{2} W(\langle x|p_l^+ \rangle, \langle x|p_r^- \rangle) = -p_l R^l T^{r*} = p_r R^{r*} T^l \quad (175)$$

Obsérvese que hay que distinguir entre amplitudes de derecha o izquierda. Sin embargo los coeficientes de transmisión de derecha e izquierda sí son iguales,

$$T^l \equiv \frac{\text{flujo transmitido}}{\text{flujo incidente}} = \frac{p_r}{p_l} |T^l|^2 \quad (176)$$

$$T^r \equiv \frac{\text{flujo transmitido}}{\text{flujo incidente}} = \frac{p_l}{p_r} |T^r|^2. \quad (177)$$

$T^l = T^r$. Lo mismo ocurre para el coeficiente de reflexión,

$$\mathcal{R}^{r,l} \equiv \frac{\text{flujo reflejado}}{\text{flujo incidente}} = |R^{l,r}|^2. \quad (178)$$

Se define una matriz S unitaria mediante los cocientes entre coeficientes que multiplican a las ondas planas normalizadas a flujo unidad,

$$S(p) = \begin{pmatrix} T^l(p) \sqrt{\frac{p_r}{p_l}} & R^r(p) \\ R^l(p) & T^r(p) \sqrt{\frac{p_l}{p_r}} \end{pmatrix} \quad (179)$$

Los dos últimos resultados en (172) implican que las fases de las amplitudes de reflexión y transmisión se relacionan mediante

$$\Phi_{T^l} = \Phi_{T^r} \equiv \Phi_T \quad (180)$$

$$\Phi_{R^l} + \Phi_{R^r} = \pi + 2\Phi_T. \quad (181)$$

9 Potenciales dependientes del tiempo

Los potenciales dependientes del tiempo surgen como modelos sencillos en los que el efecto de uno o más grados de libertad que no quieren considerarse explícitamente se simulan aproximadamente con una barrera $V(x, t)$. También pueden corresponder a la acción de un campo oscilante acoplado al movimiento del sistema. En el caso general la evolución de un paquete de ondas en estas circunstancias puede calcularse con métodos descritos en la sección 10.1. La característica fundamental de estos choques es la aparición de energías que no estaban presentes en el paquete inicial debido a la inelasticidad. El caso en el que el potencial es oscilante admite un tratamiento especial [71]. Si el periodo es $2\pi/\omega$ la ecuación de Schrödinger es invariante con respecto a la transformación

$$t \rightarrow t + \frac{2\pi}{\omega}, \quad (182)$$

y aplicando el teorema de Floquet existen soluciones de la forma

$$\psi(x, t) = e^{i\nu t} \Phi(x, t), \quad (183)$$

donde ν es una constante, y Φ tiene la periodicidad del potencial,

$$\Phi(x, t + 2\pi/\omega) = \Phi(x, t). \quad (184)$$

Desarrollando Φ en serie de Fourier,

$$\psi(x, t) = \sum_{-\infty}^{\infty} e^{[i(\nu+n\omega)t]} F_n(x) \quad (185)$$

donde F_n son los coeficientes de Fourier. Como $i\hbar\partial/\partial t$ es el operador de energía, el término n -ésimo corresponde a una energía $\hbar\nu + n\hbar\omega$, y (185) puede interpretarse como el estado correspondiente a una energía incidente

$\hbar\nu$ con componentes salientes, llamadas “bandas laterales”, de energías discretas debidas al potencial oscilante. Este formalismo se ha empleado para determinar el carácter súbito o adiabático de la colisión por efecto túnel. La frecuencia de oscilación constituye un parámetro de referencia con respecto al cual las colisiones se pueden clasificar como rápidas o lentas [72].

Una dependencia temporal de importantes consecuencias prácticas es el cambio de los niveles asintóticos que implica una variación de la diferencia de potencial aplicada a una estructura. En este caso es necesario determinar el tiempo de respuesta de una solución estacionaria de la configuración inicial hasta adaptarse a la configuración final. Este tiempo de respuesta limita la velocidad a la que idealmente podría trabajar un dispositivo semiconductor. Existen publicaciones tratando este problema [73] aunque no se dispone de una teoría general. El problema en el que una barrera infinita, que actúa como compuerta, se elimina súbitamente se ha analizado con detalle en [74]. Azbel ha estudiado el efecto perturbativo de potenciales débiles dependientes suavemente del tiempo en las soluciones estacionarias del sistema no perturbado, en particular en la zona de efecto túnel, y describe resonancias (importantes amplificaciones de la transmisión) a energías y tiempos particulares [75]. Por último, Martin y Sassoli de Bianchi han generalizado el teorema de Levinson para potenciales oscilantes [76].

10 Métodos numéricos y aproximados

Los métodos aproximados son muy importantes en las colisiones que implican varias dimensiones espaciales debido a las dificultades para realizar cálculos exactos. En una dimensión el uso de métodos aproximados tales como WKB , la aproximación de Born [77] o métodos variacionales es posible en principio,

pero su interés está un tanto limitado por la relativa facilidad con la que se obtienen soluciones virtualmente exactas mediante métodos numéricos. No obstante las teorías aproximadas son útiles cuando contribuyen a una explicación sencilla e intuitiva de los fenómenos o proporcionan resultados analíticos.

10.1 Paquetes de onda dependientes del tiempo

La mayoría de los métodos que se usan en la actualidad para propagar paquetes de ondas se han puesto a prueba primero en una dimensión [78], y existen varios programas disponibles. El método basado en el desarrollo de Chebychev del propagador combinado con la transformada rápida de Fourier es el más popular en dos o más dimensiones. Sin embargo, en una dimensión otros métodos son más rápidos y fáciles de programar [79], por ejemplo el método de Koonin [80]. Este método es simple, eficiente y estable. Se basa en el siguiente esquema unitario de propagación ($\hbar = 1$),

$$\psi^{n+1} = \left(\frac{1 - iH\Delta t/2}{1 + iH\Delta t/2} \right) \psi^n, \quad (186)$$

donde ψ^n es la función de onda en el paso de tiempo n . El estado inicial más común es el paquete de ondas Gaussiano (106). La posición espacial se discretiza mediante el índice j , $\psi(x, t) \rightarrow \psi_j^n$. Los valores de x se convierten en $j\Delta x$, donde Δx es la anchura de la celda espacial. De forma similar la variable tiempo toma los valores $n\Delta t$, donde Δt es el paso elemental de tiempo. La derivada segunda espacial se aproxima como

$$\psi_j'' = \frac{1}{\Delta x^2}(\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}) + O(\Delta x^2). \quad (187)$$

El algoritmo se basa en escribir $\psi^{n+1} = \chi - \psi^n$, donde

$$(1 + iH\Delta t/2)\chi = 2\psi^n. \quad (188)$$

La discretización espacial de la última ecuación lleva a un sistema lineal tridiagonal que puede resolverse mediante subrutinas adaptadas a este caso. El método se adapta con facilidad a potenciales complejos.

10.2 Métodos de matrices de transferencia

En un gran número de artículos se resuelve la ecuación de Schrödinger estacionaria mediante métodos de matrices de transferencia [81-90]. La idea básica es fragmentar el potencial en celdas. Las matrices de transferencia conectan la solución a ambos lados de cada celda. Este procedimiento se adapta muy bien a las series de pozos y/o barreras, que han despertado tanto interés por su conexión con la tecnología de semiconductores, dada la sencillez de las matrices implicadas. En realidad el método es aplicable en casos más complejos, ya que cualquier forma del potencial puede reducirse a pequeños fragmentos (de perfil plano o lineales) descritos por matrices sencillas.

Kalotas y Lee [81] han desarrollado una técnica basada en reemplazar el potencial por una secuencia de barreras o pozos de altura (interpolada) V_j , $j = 1, \dots, n$ y anchura ω . Definiendo la matriz

$$\mathbf{K}[\alpha_j, \omega] = \begin{pmatrix} \cosh \alpha \omega & -(1/\alpha) \sinh \alpha \omega \\ -\alpha \sinh \alpha \omega & \cosh \alpha \omega \end{pmatrix} \quad (189)$$

donde $\alpha_j = [2m(V_j - E)/\hbar^2]^{1/2}$ y usando para el producto de estas matrices la notación

$$\mathbf{P} \equiv \Pi_{j=1}^n \mathbf{K}[\alpha_j, \omega] \quad (190)$$

la amplitud de transmisión viene dada por

$$T(p) = \frac{e^{-ikn\omega}}{(\mathbf{P}_{11} + \mathbf{P}_{22}) + i(\mathbf{P}_{12}k - \mathbf{P}_{21}/k)}. \quad (191)$$

Con técnicas similares Sprung, Wu y Martorell [82] expresan los coeficientes de transmisión y reflexión en términos de las amplitudes de las celdas individuales para potenciales compuestos por N celdas idénticas, lo cual es especialmente útil en los potenciales conocidos como “super-redes”, que presentan “mini-bandas” e interesantes propiedades de transporte como la posible resistividad diferencial negativa.

Las matrices de transferencia también son útiles para estudiar estadísticamente colisiones en redes desordenadas (por ejemplo secuencias de barreras de anchura, posición o altura aleatoria) [83].

Rozman, Reineker y Tehver [84] derivan un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas para las amplitudes de transmisión y reflexión de los potenciales “truncados” $U^r(x_0) \equiv U(x)\theta(x_0 - x)$ de un potencial real arbitrario $U(x)$. Sean $R^{r,l}(x_0)$ y $T(x_0)$ las amplitudes de reflexión y transmisión del potencial truncado (en [84] se admite una posible asimetría en los niveles asintóticos). El sistema de ecuaciones viene dado en función de la variable $a(x) = -imU(x)/(k\hbar^2)$ por

$$T'(x_0) = a(x_0)T(x_0)(1 + R^r(x_0)e^{2ikx_0}) \quad (192)$$

$$R^{l'}(x_0) = a(x_0)T^l(x_0)T^r(x_0)e^{2ikx_0} \quad (193)$$

$$R^{r'}(x_0) = a(x_0)e^{-2ikx_0}(1 + R^r(x_0)e^{2ikx_0})^2 \quad (194)$$

con condiciones de contorno

$$R_l(-\infty) = R^r(-\infty) = 0 \quad (195)$$

$$T(-\infty) = 1. \quad (196)$$

10.3 Colisiones múltiples

El método de “colisiones múltiples” [91-97] es similar al anterior. Consiste en descomponer el potencial en una suma de potenciales,

$$V = \sum_i v^{(i)} \quad (197)$$

El operador de transición global T_{op} puede escribirse como una serie en la que intervienen los operadores de transición individuales $t_{\text{op}}^{(i)}$ intercalados por resolventes para el movimiento libre,

$$T_{\text{op}} = \sum_i t_{\text{op}}^{(i)} + \sum_i \sum_{j \neq i} t_{\text{op}}^{(i)} G_0 t_{\text{op}}^{(j)} + \dots \quad (198)$$

En casos favorables, esta técnica provee relaciones simples para las amplitudes de transmisión y reflexión, y en general una imagen sencilla del proceso global en función de una secuencia de reflexiones y transmisiones en cada barrera. La amplitud total se obtiene como una suma coherente de las amplitudes de los diferentes caminos posibles (clasificados según el número de interacciones), lo que lleva a una elegante visualización de efectos tales como las resonancias (que corresponden a energías para las cuales las fases de los múltiples procesos de colisión interfieren constructivamente).

10.4 Ecuaciones diferenciales

Es posible resolver directamente la ecuación estacionaria de Schrödinger mediante subrutinas para sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden. El método se basa en descomponer la ecuación de Schrödinger de segundo orden en dos ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden para las variables $X = \psi(x)$ y $Y = d\psi(x)/dx$. Las condiciones de contorno se eligen de acuerdo con una de las funciones de Jost.

10.5 Aproximación clásica de la transmitancia

Las transmitancias para paquetes de ondas dependientes del tiempo correspondientes a colectivos clásicos pueden ser muy próximas a las cuánticas. Este acuerdo puede darse también en la “zona de tuneleo” donde la energía promedio $\langle E \rangle$ es inferior al umbral clásico (o energía máxima de la barrera, V_0). Tal acuerdo se basa en la asociación estadística de la función de onda con un colectivo clásico, y se perdería si asociáramos una única partícula al paquete de ondas, como sugiere el teorema de Ehrenfest. El presente tratamiento supone un estado Gaussiano inicial con momento inicial medio p_c [98].

Puede demostrarse que la transmitancia clásica depende sólo de dos parámetros adimensionales f y r .

$$r = \frac{\langle E \rangle}{V_0}, \quad f = \frac{p_c^2}{2m\langle E \rangle} \quad (199)$$

donde m es la masa de la partícula. También es importante, en el caso cuántico, el parámetro $U_0 = (2mV_0)/(\hbar^2 a^2)$, donde a^{-1} es una anchura característica de la barrera. La fórmula clásica para la transmitancia se obtiene asociando la Gaussiana inicial con un colectivo clásico con la misma distribución de momentos. La probabilidad de transmisión clásica es la fracción del colectivo con energía por encima del umbral clásico [98],

$$\mathcal{T} = 1 - \mathcal{P}[(1 - M)/S] \quad (200)$$

donde $\mathcal{P}[(1 - M)/S]$ es la integral de probabilidad de la distribución Gaussiana $\mathcal{Z}[(\Pi - M)/S]$ con valor medio $M = (fr)^{1/2}$ y varianza $S^2 = (1 - f)r$. Π es el momento adimensional $\Pi = p/(2mV_0)^{1/2}$.

De esta expresión puede concluirse que:

(1) La transmitancia no depende de la posición inicial del paquete, siempre que esté suficientemente alejado (que no solape inicialmente con el potencial).

(2) La transmitancia no depende del parámetro U_0 ni de la forma del potencial.

(3) La transmitancia depende sólo de los parámetros adimensionales f y r .

(4) La transmitancia tiene un máximo en $f = r$, para $f < 1$.

La validez del paralelo cuántico del primer punto se justifica observando las definiciones dadas en la sección dedicada a la transmitancia. Propagaciones numéricas de paquetes de ondas confirman la validez de las demás predicciones [98]. Se cumplen en el caso cuántico excepto en los siguientes supuestos: En el límite estacionario (f próximo a 1), para valores pequeños de U_0 , para potenciales discontinuos, y cuando las anchuras de las resonancia (si las hubiera) son mayores que la del paquete de ondas. Los resultados puramente clásicos son incluso mejores que métodos semiclásicos mucho más elaborados basados en la suposición de que el paquete evoluciona manteniendo una forma Gaussiana [99].

Para obtener la fórmula de la transmitancia (200) no se ha supuesto más que el acuerdo con la distribución marginal inicial de momentos. El colectivo clásico puede especificarse imponiendo el acuerdo con la función de Wigner. La idea se ha explotado en una serie de aplicaciones en física molecular. Esta especificación es necesaria para obtener cantidades dinámicas y la evolución completa del colectivo clásico.

10.6 El método WKB y sus limitaciones

El método *WKB* proporciona una estimación sencilla del coeficiente de transmisión. Para una barrera con dos puntos de retorno $a < b$ a energía E el coeficiente de transmisión *WKB* viene dado por

$$\mathcal{T}_{WKB} = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{a(E)}^{b(E)} dx [2m(V - E)]^{1/2} \right\} \quad (201)$$

La mayor parte de los textos de mecánica cuántica advierten del fallo de esta expresión para energías muy cercanas al máximo del potencial y para potenciales que cambian con demasiada rapidez, y nos llevan a creer que para barreras opacas (anchas y altas de forma que $\int_a^b dx [2m(V - E)]^{1/2}$ sea considerablemente mayor que la unidad) la ecuación (201) es satisfactoria. Sin embargo para energías muy pequeñas existe otro problema [100]. En el límite $E \rightarrow 0$ y para potenciales en los que converge la integral $\int_{a(0)}^{b(0)} dx (2mV)^{1/2}$, $\mathcal{T}_{WKB}$ tiende a un límite finito distinto de cero. Por ello el error relativo $\mathcal{T}_{exact}/\mathcal{T}_{WKB}$ puede ser arbitrariamente grande para energías suficientemente pequeñas. Si queremos ir más allá de la fórmula anterior y obtener la función de onda *WKB* para la colisión con una barrera nos enfrentamos en general con el problema de “empate” de soluciones (cinco en un caso típico con dos puntos de retorno) debido a la no uniformidad del desarrollo semiclásico (es decir a que en cada región se requiere una expresión asintótica diferente) que hace a este método un tanto engorroso. Keller [101] propone una representación de la solución uniforme espacialmente que lleva a la siguiente expresión para la amplitud de transmisión,

$$\begin{aligned} T &= \frac{\exp[i\phi - ia \ln(a/e)]}{(1 + e^{2\pi a})^{1/2}} \\ &\times \exp i \left(\int_{-\infty}^{x_0} \{[k^2 - V(x)]^{1/2} - k\} dx \right) \end{aligned}$$

$$- k(x_1 - x_0) + \int_{x_1}^{\infty} \{k^2 - V(x)\}^{1/2} - k\} dx \quad (202)$$

donde

$$\phi = \arg \Gamma(1/2 + ia), \quad \phi = 0 \quad \text{para } a = 0 \quad (203)$$

$$\pi a = \int_{x_0}^{x_1} [V(x) - k^2]^{1/2} dx. \quad (204)$$

11 Conclusiones

En esta monografía hemos intentado ofrecer una perspectiva amplia, actualizada y unificada de las colisiones cuánticas en una dimensión combinando resultados conocidos pero dispersos con aportaciones originales. Nuestro deseo es que sea tanto un trabajo de consulta como una incitación a seguir profundizando en una serie de problemas abiertos. Confiamos en que el lector concluya con nosotros que este no es un campo cerrado y bien establecido donde queda poco por hacer. Por el contrario, nos encontramos con multitud de cuestiones no resueltas de carácter conceptual o técnico relacionadas a menudo con aplicaciones de interés tecnológico. La mayoría de estos problemas se encuentran en el dominio de estados y/o potenciales dependientes del tiempo, que los tratamientos convencionales ignoran o consideran insuficientemente.

Agradecimientos: Este trabajo no podría haberse realizado sin la colaboración de S. Brouard, V. Delgado, D. Macías, J. P. Palao, R. Sala, y R. F. Snider. Agradezco también al Gobierno de Canarias la financiación del Proyecto PI2/95.

REFERENCIAS

1. G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* (Les Editions de Physique, Paris, 1988)

2. Y. B. By y S. Efrima, Phys. Rev. B **28** (1983) 4126
3. R. Veswanathan, S. Shi, E. Villalonga y H. Rabitz, J. Chem. Phys. **91** (1989) 2333
4. J. G. Muga, V. Delgado, R. Sala y R. F. Snider J. Chem. Phys. **104** (1996) 7015
5. I. Kay y H. E. Moses, Nuovo Cimento **3** (1956) 276
6. L. D. Faddeev, Am. Math. Soc. Transl. **2** (1964) 139
7. P. Deift y E. Trubowitz, Commun. Pure Appl. Math. **32** (1979) 121
8. R. G. Newton, J. Math. Phys. **21** (1980) 493
9. R. G. Newton, J. Math. Phys. **24** (1983) 2152
10. R. G. Newton, J. Math. Phys. **25** (1984) 2991
11. B. N. Zakhariev y A. A. Suzko, *Direct and Inverse Problems* (Springer, Berlin, 1990)
12. J. R. Taylor, *Scattering Theory* (John Wiley, New York, 1972).
13. R. G. Netwon, *Scattering Theory of Waves and Particles* (McGraw-Hill, New York, 1966)
14. B. Diu, Eur. Phys. Lett. **1** (1980) 231
15. M. S. Marinov y B. Segev, J. Phys. A. **29** (1996) 2839
16. W. G. Gibson, Phys. Rev. A **36** (1987) 564;
17. M. Sassoli de Bianchi, J. Math. Phys. **35** (1994) 2719

18. A. M. Kriman y D. K. Ferry, *Superlattices and Microstructures* **3** (1987) 503
19. Y. Fu, *Phys. Lett. A* **205** (1995) 419
20. A. H. Kahn, *Am. J. Phys.* **29** (1961) 77
21. J. H. Eberly, *Am. J. Phys.* **33** (1965) 771.
22. J. Formánek, *Am. J. Phys.* **44** (1976) 778.
23. A. N. Kamal, *Am. J. Phys.* **52** (1984) 46
24. A. Tagliacozzo, *Il Nuovo Cimento* **10** (1988) 363
25. M. H. Bramhall y B. M. Casper, *Am. J. Phys.* **38** (1970) 1136
26. A. Edgar, *Am. J. Phys.* **63** (1995) 136
27. J. G. Muga, R. Sala and R. F. Snider, *Physica Scripta* **47** (1993) 732
28. W. Jaworski y D. Wardlaw, *Phys. Rev. A* **37** (1988) 2843
29. M. Tsuchiya, T. Matsusue y H. Sakaki, *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987) 2356
30. H. Mizuta y T. Tanoue, *The Physics and Applications of Resonant Tunnelling Diodes*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995)
31. B. A. van Tiggelen, A. Tip y A. Lagendijk, *J. Phys. A* **26** (1993) 1731
32. W. Jaworsky y D. M. Wardlaw, *Phys. Rev. A* **37** (1987) 2843
33. E. H. Hauge, J. P. Falck y T. A. Fjeldly, *Phys. Rev. B* **36** (1987) 4203
34. E. H. Hauge y J. A. Stovneng, *Rev. Mod. Phys.* **61** (1989) 917

- 35. V. S. Olkhovsky y E. Recami, Phys. Rep. **214**, (1992) 339
- 36. J. G. Muga, S. Brouard y R. Sala, Phys. Lett. A **167** (1992) 24
- 37. R. S. Dumont y T. L. Marchioro II, Phys. Rev. A **47** (1993) 85
- 38. R. Leavens, Physics Lett. A, **178** (1993) 27
- 39. J. G. Muga y H. Cruz, Physica B **179**, (1992) 326
- 40. H. Cruz y J. G. Muga, Phys. Rev. B **45** (1992) 11885
- 41. S. Brouard, R. Sala y J. G. Muga, Phys. Rev. A **49** (1994) 4312.
- 42. J. G. Muga, S. Brouard y D. Macías, Annals de Physics (NY) **240** (1995) 351
- 43. T. E. Hartman, J. Appl. Phys. **33** (1962) 3427
- 44. J. R. Fletcher, J. Phys. C: Solid State Phys. **18** (1985) L55
- 45. C. R. Leavens y G. C. Aers, Phys. Rev. B **39** (1989) 1202
- 46. F. T. Smith, Phys. Rev **118** (1960) 349
- 47. M Sassoli de Bianchi **66** (1993) 361
- 48. L. N. Pandey, D. Sahu y T. F. George, Appl. Phys. Lett. **56** (1990) 277
- 49. J. M. Jauch, K. B. Sinha y B. N. Misra, Helv. Phys. Acta **45** (1972) 398; T. Y. Tsang y T. A. Osborn, Nucl. Phys. A **247** (1975) 43; P. Brumer, D. E. Fitz y D. Wardlaw, J. Chem. Phys. **72** (1980) 386 y referencias citadas.
- 50. Y. Avishai y Y. B. Band, Phys. Rev. B **32** (1985) 2674

51. R. Dashen, S. Ma y H. J. Bernstein, *Phys. Rev.* **187** (1969) 345
52. W. Trzeciakowski y M. Gurioli, *J. Phys. Condensed Matter* **5** (1993) 105; **5** (1993) 1701
53. R. D. Levine, *Quantum Mechanics of Molecular Rate Processes* (Oxford University Press, Oxford, 1969)
54. J. G. Muga, V. Delgado y R. F. Snider, *Phys. Rev. B* **52** (1995) 16381.
55. D. Onley and A. Kumar, *Am. J. Phys.* **59** (1991) 562
56. H. M. Nussenzveig, *Causality and Dispersion Relations* (Academic Press, New York y Londres, 1972).
57. R. G. Newton, *Ann. Phys. (N. Y.)* **14** (1961) 333; M. L. Goldberger y K. M. Watson, *Collision Theory* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1964) Cap. 8; L. Fonda, G. C. Ghirardi y A. Rimini, *Rep. Prog. Phys.* **41** (1977) 587; A. Peres, *Ann. Phys. (N.Y.)* **129** (1980) 33; H. Jacobovits, Y. Rothschild y Lecitan, *Am. J. Phys.* **63** (1995) 439
58. G. García Calderón, en *Symmetries in Physics*, editado por A. Frank y K. B. Wolf (Springer-Verlag, Berlin, 1992) p. 252
59. G. García Calderón, J. L. Mateos y M. Moshinsky *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 337
60. B. Misra y E. C. G. Sudarshan, *J. Math. Phys.* **18** (1977) 756; A. Peres, *Am. J. Phys.* **48** (1980) 931; W. M. Itano, J. D. Heinzen, J. J. Bollinger y D. J. Winely, *Phys. Rev. A* **41** (1990) 2295; K. Urbanowski, *Phys. Rev. A* **50** (1994) 2847
61. M. Moshinsky, *Phys. Rev.* **84** (1951) 525.

62. G. García Calderón, G. Loyola y M. Moshinsky, en *Symmetries in Physics*, editado por A. Frank y K. B. Wolf (Springer-Verlag, Berlin, 1992), p.273
63. C. L. Hammer, T. A. Weber y V. S. Zidell, *Am. J. Phys.* **45** (1977) 933
64. M. Abramowitz y I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1972); La función w es un caso particular de la función de Moshinsky, véase [61] y H. M. Nussenzveig, en *Symmetries in Physics*, editado por A. Frank y K. B. Wolf (Springer-Verlag, Berlin, 1992), p. 293
65. P. Exner, *Open Quantum Systems and Feynman Integrals* (Reidel, Dordrecht, 1985)
66. W. E. Lamb, *Physics Today* **22** (1969) 23
67. M. Kababe, M. Kondo, N. Matsuura y K. Yamamoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* **22** (1983) L64
68. J. G. Muga, R. F. Snider y G. W. Wei, *Europhysics Letters* **35** (1996) 247
69. G. R. Allcock, *Ann. Phys.* **53** (1969) 311; A. J. Bracken, *J. Phys. A* **27** (1994) 2197
70. S. Brouard, D. Macías y J. G. Muga, *J. Phys. A* **27** (1994) L439; D. Macías, S. Brouard y J. G. Muga, *Chem. Phys. Lett* **228** (1994) 672
71. A. Pimpale, S. Holloway y R. J. Smith, *J. Phys. A* **24** (1991) 3533

72. M. Büttiker y R. Landauer, Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 1739; M. Büttiker y R. Landauer, Physica Scripta **32** (1985) 429; C. Zhang y N. Tzoar, Physica Scripta **T25** (1989) 333; J. A. Stovneng y E. H. Hauge, J. Stat. Phys. **57** (1989) 841; S. Takagi, Proc. 4th Int. Symp. Foundations of Quantum Mechanics, Tokyo, 1992, JJAP Series **9** (1993) 82
73. Y. Fu y M. Willander, J. Appl. Phys. **72** (1992) 3593
74. S. Brouard and J. G. Muga, Phys. Rev. A **54** (1996) 3055
75. M. Ya Azbel, Phys. Rev. B **43** (1991) 6847
76. Ph. A. Martin y M. Sassoli de Bianchi, Europhys. Lett. **34** (1996) 639
77. I. R. Lapidus, Am. J. Phys. **37** (1969) 1064; P. B. James, Am. J. Phys. **38** (1970) 1319
78. *Time dependent Methods for Quantum Dynamics*, editado por K. C. Kulyer, (North Holly, Amsterdam, 1991)
79. R. Kosloff, J. Phys. Chem. **92** (1988) 2087; F. Ancilotto, A. Selloni, y E. Tosatti, Phys. Rev. B **40** (1989) 3729
80. S. E. Koonin, *Computational Physics* (Benjamin, Menlo Park, 1985)
81. T. M. Kalotas y A. R. Lee, Am. J. Phys. **59** (1991) 48
82. D. W. Sprung, H. Wu y J. Martorell, Am. J. Phys. **61** (1993) 1118; R. G. Newton, Am. J. Phys. **62** (1994) 1042
83. A. Peres, J. Math. Phys. **24** (1983) 1110
84. M. G. Rozman, P. Reineker y R. Tehver, Phys. Rev. A **49**(1994) 3310

85. W. W. Lui y M. Fukuma, J. Appl. Phys. **60** (1986) 1555
86. E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (Wiley, New York, 1970)
87. D. J. Griffiths y N. F. Taussig, Am. J. Phys **60** (1992) 883
88. J. S. Walker y J. Gathright, Am. J. Phys. **62** (1994) 408
89. B. Mendez y F. Domínguez Adame, Am. J. Phys. **62** (1994) 143
90. J. Kowalski y J. L. Fry, J. Math. Phys **28** (1987) 2407
91. J. E. Beam, Am. J. Phys. **38** (1970) 1395
92. D. Lessie, Am. J. Phys. **54** (1986) 452
93. D. Lessie y J. Spadaro, Am. J. Phys. **54** (1986) 909
94. A. Anderson, Am. J. Phys. **57** (1989) 230
95. Y. Zohta, K. Nakamura y H. Ezawa, Solid State Comm. **80** (1991) 885
96. M. G. Rozman, P. Reineker y R. Tehver, Phys. Lett. A **187** (1994) 127.
97. H. W. Lee, A. Zysnarski y Phillip Kerr, Am. J. Phys. **57** (1989) 729
98. J. G. Muga, J. Phys. A **24** (1991) 2003
99. R. E. Turner y R. F. Snider, J. Chem. Phys. **87** (1987) 910
100. J. Crofton, P. A. Barnes y M. J. Bozack, Am. J. Phys. **60** (1992) 499
101. J. B. Keller, Am. J. Phys. **54** (1986) 546